Tome 22 N° 11 Novembre 1961

LE JOURNAL DE PHYSIQUE

ET

LE RADIUM

LA DILATATION THERMIQUE DU MILIEU CRISTALLIN

Par J. LAVAL,
Collège de France, Paris.

III

La dilatation thermique et la chaleur spécifique à volume constant. Loi de Grüneisen.

Résumé. — Selon Grüneisen, le coefficient de dilatation et la chaleur spécifique à volume constant resteraient dans le même rapport à toute température. En évaluant la dilatation thermique à partir de l'énergie potentielle du milieu cristallin, on aboutit à la conclusion que la loi de Grüneisen n'est qu'approximative ; à peu près en accord avec les faits aux températures moyennes (tant que la chaleur spécifique à volume constant garde sensiblement la même grandeur), mais notablement en défaut aux températures basses et élevées.

D'autre part, on trouve que la constante de Grüneisen est déterminée principalement par le rapport entre les grandeurs absolues des dérivées troisièmes et des dérivées secondes de l'énergie potentielle du milieu cristallin, et non par la variation de la fréquence des oscillations thermiques en fonction de la dilatation. Enfin, on établit que, si le milieu cristallin est libre de toute contrainte, les dérivées secondes de son énergie potentielle, les fréquences des oscillations thermiques et les coefficients d'élasticité sont, en gros, des fonctions exponentielles décroissantes de la dilatation thermique.

Abstract. — According to Grüneisen, the expansion coefficient and the specific heat at constant volume would remain in the same ratio at any temperature. The estimation of the thermal expansion from the potential energy of the crystalline medium leads to the conclusion that Grüneisen's law is only approximate ; it is nearly in agreement with facts at medium temperatures (as long as the specific heat at constant volume remains about the same magnitude), but at low and high temperatures it is greatly at variance.

Moreover, we find that the Grüneisen constant is mainly determined by the ratio between the absolute magnitudes of the third and second derivatives of the potential energy of the crystalline medium, and not by the variation of the frequency of the thermal oscillations in relation to the expansion. Lastly we show that, if the crystalline medium is free from constraint, the second derivatives of its potential energy, the frequencies of the thermal oscillations and the elastic coefficients are roughly decreasing exponential functions of the thermal expansion.

A. **Le coefficient de dilatation et la chaleur spécifique à volume constant. Loi de Grüneisen** (¹). — Supposons les tensions secondaires négligeables et les facteurs $\xi_{S\tau}$ (24) invariables, tous égaux, de grandeur ξ (41-42). En ce cas, la tension thermique T (12) est proportionnelle à l'énergie totale U des oscillations fondamentales :

$$T = \frac{\xi U}{\mathcal{N} \mu v}; \quad U = \sum_{S\tau} W_{S\tau}.$$

(¹) Les formules numérotées de 1 à 31, les références de [1] à [5], les figures 1 et 2 se trouvent dans la première partie (p. 451) ; les formules numérotées de 32 à 53, les références de [6] à [10], les figures 3, 4, 5, 6, 7, dans la seconde partie (p. 465).

Et le coefficient de dilatation linéaire devient

$$\alpha = \frac{\xi k}{\mathcal{N}(\mu \mathcal{C} + 3H)} \sum_{S\tau} \varepsilon_{S\tau} \qquad (54)$$

$$H = \frac{\xi}{\mathcal{N}} \sum_{S\tau} \left[W - \omega \left(\frac{\partial W}{\partial \omega}\right)_{\Theta} \frac{\mathrm{d\,Log}\ \omega}{\mathrm{d\,Log}\ v} \right]_{S\tau}.$$

Admettons aussi que le coefficient $\mathcal{C}$ (8) est invariable, et que $3H$ peut être tenu pour nul par rapport à $\mu \mathcal{C}$. Il vient :

$$\alpha = \frac{\xi k}{\mathcal{N} \mu \mathcal{C}} \sum_{S\tau} \varepsilon_{S\tau} = \xi \frac{c_{0v}}{\mathcal{C}}$$

c_{0v} est la chaleur spécifique à volume constant qui

est prise par les oscillations fondamentales ; et selon notre hypothèse, c_{0v} se confond avec la chaleur spécifique définie par la théorie classique :

$$c_{0v} = (k/\mathcal{N}\mu) \sum_{S\tau} \varepsilon_{S\tau}. \qquad (55)$$

Si toutes les conditions que nous venons de poser étaient satisfaites, le coefficient de dilatation linéaire serait proportionnel à la chaleur spécifique c_{0v} qui revient aux oscillations fondamentales :

$$\alpha/c_{0v} = \xi/\mathcal{C}. \qquad (56)$$

Mais les facteurs $\xi_{S\tau}$ (24) sont inégaux et varient légèrement avec la température ; le coefficient $\mathcal{C}$ diminue quand le milieu cristallin se dilate ; aux températures élevées les tensions secondaires T_2 (28), T_3 (29), ... contribuent à la dilatation ; et la tension T_2 est du second degré, la tension T_3 du troisième degré par rapport aux énergies $W_{S\tau}$ (3) des oscillations fondamentales. Donc le rapport α/c_{0v} varie quand la température s'élève ; et sa variation est considérable aux basses et aux hautes températures. Car si la température est basse, quand elle s'élève les fonctions $\varepsilon_{S\tau}$ (4) ne restent pas entre elles dans des rapports constants, et quand la température est haute, les tensions secondaires prennent part à la dilatation.

Toutefois, aux températures moyennes — qui se rapportent à la branche *BC* de la courbe *OD* (*fig.* 7, *J. Physique Rad.* Août-Sept 1961, **22**. fasc. 8-9, 470). — toutes les fonctions $\varepsilon_{S\tau}$ (4) sont sensiblement égales, car toutes atteignent sensiblement l'unité ; et les tensions secondaires restent encore négligeables par rapport à la tension principale ; en conséquence, l'égalité (56) est à peu près satisfaite. D'où l'on déduit, compte tenu de la relation (8) entre le coefficient $\mathcal{C}$ et le module de compressibilité isotherme $\varkappa$, une nouvelle égalité :

$$\frac{\beta}{c_{0v}} \frac{V}{\varkappa} = \frac{\xi}{\mu} \qquad (57)$$

où V est le volume spécifique :

$$V = v/\mu \quad \left(\beta = 3\alpha, \varkappa = \frac{1}{\Gamma}\right) \qquad (58)$$

Le facteur moyen ξ (25) reste à peu près constant quand le milieu cristallin se dilate. Donc, aux températures moyennes, le rapport $\dfrac{\beta}{c_{v0}} \dfrac{V}{\varkappa}$ est aussi approximativement constant ; il prend les grandeurs suivantes (déduites des facteurs moyens ξ évalués précédemment (42)).

	Al	Feα	Cu
$\dfrac{\xi}{\mu}$	2,1	1,67	1,9

B. **La théorie et la loi de Grüneisen.** — Mais la chaleur spécifique, c_v, à volume constant, ne se réduit pas à la chaleur spécifique c_{0v} (55) qui est prise par les oscillations fondamentales. Elle comprend en plus trois termes : l'un c_{ev} d'origine électronique, l'autre c_{mv} d'origine magnétique, important seulement si le cristal est ferromagnétique, le troisième c_{sv} revient aux oscillations secondaires :

$$c_v = c_{0v} + c_{ev} + c_{mv} + c_{sv}. \qquad (59)$$

Grüneisen a mesuré sur les cristaux cubiques envisagés, *à des températures moyennes*, les coefficients de dilatation et les chaleurs spécifiques [11].

Il trouve que le rapport (β/c_v) est sensiblement constant. C'est qu'aux températures moyennes, toutes les fonctions $\varepsilon_{S\tau}$ (4) sont à peine moindres que l'unité ; donc à ces températures

$$\frac{\beta}{c_v} = \frac{\xi}{\mathcal{C}\,[1 + (c_{ev} + c_{mv} + c_{sv})/c_{0v}]}$$

Et, quand la température s'élève, le rapport $(c_{ev} + c_{mv} + c_{sv})/c_{0v}$ augmente, et cette augmentation compense, au moins en partie, la diminution du coefficient $\mathcal{C}$ (8). Mais aux températures basses et élevées, les chaleurs spécifiques c_{ev}, c_{mv}, ne croissent pas avec la température suivant la même loi que le coefficient de dilatation β [1]. Quant à la chaleur spécifique c_{sv}, négligeable aux basses et aux moyennes températures, elle ne reste pas, non plus, dans un rapport constant avec le coefficient de dilatation β lorsque la température du cristal devient proche du point de fusion. Donc aux températures basses et élevées, le rapport β/c_v varie notablement.

Pour rendre compte de ses expériences Grüneisen se réfère à la thermodynamique [11] et fait deux hypothèses :

1° Les composantes harmoniques de l'agitation thermique sont indépendantes les unes des autres ; donc chacune a la même énergie libre qu'un oscillateur harmonique de même fréquence. Ainsi l'énergie libre de l'agitation thermique est égale à la somme, $\mathcal{S}$, des énergies libres prises par les oscillations harmoniques qui forment cette agitation [2]

$$\mathcal{S} = \sum_{S\tau} \left[k\Theta \operatorname{Log.}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k\Theta}}\right) + \frac{\hbar\omega}{2}\right]_{S\tau}. \qquad (60)$$

Et l'énergie libre du cristal s'élève à

$$A = \mathcal{W}_0 + \mathcal{S} \qquad (61)$$

$\mathcal{W}_0$ (1) étant l'énergie potentielle du cristal sans agitation thermique, c'est-à-dire : les atomes au repos dans leurs positions moyennes [3].

(1) D'après les théories présentement admises et d'après la calorimétrie, la chaleur spécifique c_{ev} est grossièrement proportionnelle à la température absolue, et la chaleur spécifique c_{mv} à peu près en raison directe de la dérivée $d\sigma^2/d\Theta$, σ étant l'aimantation spécifique.

(2) Je définis ici (formule 60) l'énergie libre de l'agitation thermique par une expression explicite ; Grüneisen rapporte cette énergie à la température caractéristique de Debye.

(3) Formule (10), page 17-18, *Handbuch der Physik*, Band X.

2° Quand le volume spécifique, V(58), du milieu cristallin augmente, donc quand le cristal se dilate, les fréquences $\nu_{S\tau}$ des oscillations harmoniques faites par les atomes s'abaissent, et les dérivées $\frac{\mathrm{d\,Log.}\,\omega_{S\tau}}{\mathrm{d\,Log.}\,v}$ sont constantes, donc indépendantes de la température. Subsidiairement, Grüneisen suppose que toutes les dérivées $\mathrm{d\,Log.}\,\omega_{S\tau}/\mathrm{d\,Log.}\,v$ sont sensiblement égales, de grandeur $\frac{\mathrm{d\,Log.}\,\omega}{\mathrm{d\,Log.}\,v}$ [1]. Et de ces données, il déduit l'égalité :

$$\frac{\beta}{c_v}\frac{V}{\varkappa} = -\frac{\mathrm{d\,Log.}\,\omega}{\mathrm{d\,Log.}\,v}. \qquad (62)$$

Toutefois, dans cette égalité, Grüneisen fait état non de la chaleur spécifique globale c_v (59), mais de la chaleur spécifique classique c_{0v} (55), celle qui est prise par les oscillations harmoniques des atomes supposées indépendantes [2]. Donc le premier membre de l'égalité (57) se confond avec le premier membre de l'égalité (62) obtenue par Grüneisen. Mais je trouve que le rapport $\frac{\beta}{c_{0v}}.\frac{V}{\varkappa}$ est égal à $\frac{\xi}{\mu}$ et non au module de la dérivée $\frac{\mathrm{d\,Log.}\,\omega}{\mathrm{d\,Log.}\,v}$ [3].

Les composantes harmoniques de l'agitation thermique ne sont indépendantes qu'autant qu'elles développent entre les atomes des forces de rappel rigoureusement conformes à la loi de Hooke. Cela implique que l'énergie potentielle du cristal n'a pas de dérivées de rang supérieur à deux, c'est-à-dire que ses dérivées troisièmes et suivantes sont toutes nulles. Si l'énergie potentielle est telle, ses dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ (2) sont constantes, et les pulsations $\omega_{S\tau}$ sont constantes aussi (21) : elles ne varient point avec le volume spécifique V (58) du milieu cristallin, et les dérivées $\mathrm{d\,Log.}\,\omega_{S\tau}/\mathrm{d\,Log.}\,v$ sont donc nulles ; en outre, une élévation de la température n'entraîne nulle dilatation du cristal.

Au contraire, si les pulsations $\omega_{S\tau}$ varient avec le volume spécifique V du milieu cristallin, l'énergie potentielle du cristal admet des dérivées de rang supérieur à deux [4]. Et les forces de rappel entre les atomes n'obéissent plus à la loi de Hooke. En conséquence, l'agitation thermique n'est plus la résultante d'oscillations harmoniques indépendantes ; donc, l'énergie libre de cette agitation n'est plus conforme à l'expression classique (60), et l'énergie libre du cristal ne répond plus à l'expression (61).

Grüneisen fait donc deux hypothèses incompatibles : l'une excluant l'autre. La relation qu'il obtient (62) ne peut être admise en raison de cette contradiction.

C. **Les fréquences des oscillations fondamentales et la dilatation thermique.** — A température croissante, la structure électronique du milieu cristallin évolue. Et l'évolution est multiple.

Supposons encore le milieu cristallin libre de toute contrainte. Lorsque la dilatation grandit, la densité électronique diminue, et les énergies associées aux états des électrons varient. Cependant la diminution de la densité électronique est infime dans le corps central des atomes, elle ne prend une grandeur notable qu'à leurs confins ; de même, parmi les énergies associées aux états des électrons, seules varient sensiblement celles qui sont les plus faibles en grandeur absolue — celles qui concernent les états pris par les électrons de valence ou de conductibilité —.

D'autre part, quand l'agitation thermique s'amplifie, les échanges d'énergie se multiplient entre les ondes élastiques et les électrons faiblement liés. En conséquence, des électrons faiblement liés, en nombre croissant avec la température, sont portés à des niveaux d'énergies plus élevées que les niveaux où ils se trouvaient primitivement. En outre, si le cristal est ferromagnétique, l'agitation thermique des moments magnétiques portés par les atomes croît avec la température [5].

La structure électronique évolue même si le milieu cristallin est maintenu à volume constant. En ce cas, la densité électronique et les énergies prises par les électrons ne varient que dans une

[1] En première étude [11] Grüneisen admet, comme Einstein, que l'agitation thermique est formée d'oscillations harmoniques indépendantes qui ont toutes la même fréquence. En outre, il suppose les atomes du milieu cristallin unis par des forces centrales, et rapporte la dérivée $\mathrm{d\,Log.}\,\omega_{S\tau}/\mathrm{d\,Log.}\,v$ à de telles forces de cohésion.

[2] C'est qu'au temps où Grüneisen développa sa théorie, les chaleurs spécifiques d'origine électronique et magnétique étaient inconnues, et l'on confondait alors la chaleur spécifique c_{0v} (55) avec la chaleur spécifique globale à volume constant c_v (59).

[3] Précisément Grüneisen fait d'abord état de dérivées partielles $(\partial\,\mathrm{Log.}\,\omega_{S\tau}/\partial\,\mathrm{Log.}\,v)_\Theta$; puis il admet implicitement que ces dérivées partielles expriment la variation que les pulsations $\omega_{S\tau}$ subissent lorsque le cristal se dilate libre de toute contrainte. Cela est contraire aux faits. La dilatation thermique est entraînée par une élévation de la température ; donc les dérivées des pulsations $\omega_{S\tau}$ relatives à la dilatation thermique se rapportent à la fois à une augmentation de volume et à une élévation de la température, et sont par là des dérivées totales.

Surtout les tensions thermiques ne peuvent être rapportées, comme le fait Grüneisen, aux dérivées $\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log.}\,\omega_{S\tau}}{\partial\,\mathrm{Log.}\,v}\right)_\Theta$. Car, si le milieu cristallin est maintenu à volume constant, nulle variation des pulsations $\omega_{S\tau}$ ne peut être produite par une variation de volume, il n'existe donc plus de dérivées $(\partial\,\mathrm{Log.}\,\omega_{S\tau}/\partial\,\mathrm{Log.}\,v)_\Theta$, tandis que les tensions thermiques subsistent à volume constant et sont à température égale plus fortes que dans le milieu cristallin libre de toute contrainte.

[4] L'énergie potentielle du milieu cristallin a été le sujet de nombreuses études. Toutes les fonctions proposées pour la définir sont indéfiniment dérivables, en particulier celle que Grüneisen prend en compte.

[5] Je ne fais pas état des oscillations de plasma ; car, selon les conceptions admises, elles gardent sensiblement la même énergie à toute température.

proportion minime, même si l'élévation de la température est ample, de quelques centaines de degrés centésimaux ; mais le transfert d'électrons faiblement liés vers des niveaux d'énergies plus élevées n'est sans doute pas fortement diminué.

Cette évolution de la structure électronique, à température croissante, réduit, en grandeur absolue, l'énergie potentielle fondamentale $\mathcal{W}_0(\Theta)$ (1) du cristal, et, dans l'ensemble, toutes les dérivées de cette énergie : secondes $C_a^{\alpha\beta}$, troisièmes $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$, etc... (2). Elle a donc pour effet d'abaisser les fréquences des oscillations fondamentales ; et cet abaissement de fréquence se produit encore, mais devient minime lorsque le volume du cristal reste constant.

Restreignons encore notre étude aux cristaux formés par les métaux, et envisageons de nouveau le milieu cristallin abandonné à lui-même.

Si à la température Θ, les dérivées secondes, troisièmes, quatrièmes, ... de l'énergie potentielle $\mathcal{W}_0(\Theta)$ (1-2), sont respectivement $C_a^{\alpha\beta}(\Theta)$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}(\Theta)$, $E_{abc}^{\alpha\beta\gamma\delta}(\Theta)$ ..., à la température $\Theta + \mathrm{d}\Theta$, la dérivée seconde $C_a^{\alpha\beta}$ devient (2) :

$$C_a^{\alpha\beta}(\Theta + \mathrm{d}\Theta) = C_a^{\alpha\beta}(\Theta) + \left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}(\Theta)}{\partial\Theta}\right)_v \mathrm{d}\Theta$$
$$- \sum_{\beta\gamma} D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}(\Theta)\, b_\gamma\, \alpha\, \mathrm{d}\Theta$$
$$+ \frac{1}{2!} \sum_{bc\gamma\delta} E_{abc}^{\alpha\beta\gamma\delta}(\Theta)\, b_\gamma\, c_\delta (\alpha\, \mathrm{d}\Theta)^2 - \dots \quad (63)$$

D'où l'on déduit, les indices Θ omis :

$$\frac{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.v} = \frac{1}{\beta C_a^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial\Theta}\right)_v + \left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta \quad (64)$$

et

$$\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta = -\frac{1}{3C_a^{\alpha\beta}} \sum_{b\gamma} D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}\, b_\gamma. \quad (65)$$

A quelques rares expressions près, les deux dérivées

$$\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial\Theta}\right)_v, \quad \left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$$

sont négatives (3). La première $(\partial C_a^{\alpha\beta}/\partial\Theta)_v$, prise à volume constant par rapport à la température, est déterminée par le transfert des électrons de conductibilité vers des niveaux d'énergies élevées, et, de plus, si le cristal est ferromagnétique, par l'amplification apportée à l'agitation thermique des moments magnétiques ; elle relève donc des valeurs spécifiques électronique et magnétique. La seconde dérivée, $\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$, prise à température constante par rapport à la variation de volume, est fonction essentiellement de la différence, $c_p - c_v$ entre la chaleur spécifique sous pression constante, C_p, et la chaleur spécifique à volume constant, c_v.

A température croissante, les dérivées troisièmes $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$ (2) diminuent, dans l'ensemble, en grandeur absolue, plus vite que la dérivée seconde $C_a^{\alpha\beta}$ (2). Par là, le numérateur qui figure au second membre de l'expression (65) décroît plus rapidement que le dénominateur de la même expression. Mais cet excès de décroissance est annulée approximativement par l'amplification des translations $b = m - q$. Comme chaque facteur $\xi_{S\tau}$ (24), et pour une raison semblable, toute dérivée

$$\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$$

reste à peu près constante du zéro absolu de la température au point de fusion (4).

D'autre part, quand la température s'élève, les transferts des électrons faiblement liés se multiplient, et les modules des dérivées $\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial\Theta}\right)_v$ augmentent dans l'ensemble, tandis que les modules des produits $\beta_{(\Theta)}\, C_a^{\alpha\beta}$ diminuent presque tous (5) ; donc les modules des dérivées

$$\frac{1}{\beta C_a^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial\Theta}\right)_v$$

augmentent en très forte majorité.

Sauf au voisinage du zéro absolu, pour une même élévation de la température, l'énergie potentielle $\mathcal{W}_0(\Theta)$ (1-2) des cristaux envisagés est davantage

(1) J'ai défini précédemment [5] les dérivées secondes, $C_a^{\alpha\beta}(\Theta)$, qui se rapportent au cristal dilaté, en fonction des dérivées $C_{a0}^{\alpha\beta}, D_{ab0}^{\alpha\beta\gamma}$, au zéro absolu de la température. Pour obtenir la relation (63) il suffit de prendre dans l'expression trouvée (10, 15-I) la température initiale égale à Θ et la dilatation égale à $\alpha\, \mathrm{d}\Theta$ et d'ajouter la dérivée $(\partial C_a^{\alpha\beta}/\partial\Theta)_v$ que j'avais négligée.

(2) Si l'on retient seulement les énergies potentielles biatomiques on a : $b = a = m - p$ et

$$\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta = -\frac{1}{3C_a^{\alpha\beta}} \sum_\gamma D_{2\,a}^{\alpha\beta\gamma}\, a_\gamma.$$

(3) Chez les cristaux cubiques formés par les métaux les dérivées

$$\frac{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.v}$$

sont probablement toutes négatives. Mais il n'est pas exclu que, pour certains cristaux, surtout si leur degré de symétrie est faible, quelques dérivées $\frac{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.C_{jk\,a}^{\alpha\beta}}{\mathrm{d}\,\mathrm{Log}.v}$ soient positives.

(4) La dérivée $\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$ serait rigoureusement constante si les forces de cohésion entre les atomes du milieu cristallin étaient strictement conformes à la loi de Coulomb ; c'est-à-dire si entre deux atomes séparés par une distance r l'énergie de cohésion était c/r, c étant une constante. La dérivée $\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$ resterait encore constante si l'énergie de cohésion était c/r^n.

(5) Pour une même élévation de la température la diminution relative de $|C_a^{\alpha\beta}|$ est, en général, beaucoup plus forte que l'augmentation relative du coefficient $\beta(\Theta)$, sauf aux basses températures.

affaiblie, en grandeur absolue, par la dilatation que par le transfert des électrons de conductibilité vers des niveaux d'énergies plus élevées. D'autre part, la dilatation en écartant les atomes, réduit directement et amplement les modules des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$. Au contraire, le transfert des électrons faiblement liés qui diminue notablement l'énergie potentielle n'affaiblit que fort peu le module de ses dérivées. Les basses températures écartées, il est donc à prévoir que les dérivées $\frac{1}{\beta C_a^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial \Theta}\right)_v$ sont, dans l'ensemble, petites en grandeur absolue par rapport aux dérivées $\left(\frac{\partial \text{ Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial \text{ Log}.v}\right)_\Theta$.

Toutefois, les cristaux cubiques formés par les métaux de transition ($M_{n\alpha}$, $F_{e\alpha}$, N_i, ...) ont un comportement particulier. Leur chaleur spécifique d'origine électronique est forte, probablement plus grande à toute température que la différence $c_p - c_v$ entre la valeur spécifique sous pression constante et la chaleur spécifique à volume constant. Donc chez ces cristaux, les modules des dérivées $\frac{1}{\beta C_a^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial \Theta}\right)_v$, tout en restant plus petits, sont, sans doute, du même ordre de grandeur que les modules des dérivées $\left(\frac{\partial \text{ Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial \text{ Log}.v}\right)_\Theta$.

Tout compte fait, dans leur ensemble, c'est-à-dire en très forte majorité, les dérivées totales $\frac{\text{d Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\text{d Log}.v}$ (64) croissent, en grandeur absolue, avec la température, mais les accroissements relatifs (ou les décroissances relatives) de leurs modules restent faibles entre le zéro absolu de la température et le point de fusion, de l'ordre de quelques centièmes, même pour les cristaux formés par les métaux de transition.

On trouve aussi :

$$\frac{\text{d Log}.D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}{\text{d Log}.v} = \frac{1}{\beta D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}\left(\frac{\partial D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}{\partial \Theta}\right)_v - \frac{1}{3D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}\sum_{c\delta} E_{abc}^{\alpha\beta\gamma\delta} c_\delta. \tag{66}$$

Et, du zéro absolu de la température au point de fusion, les dérivées

$$\text{d Log}.D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}/\text{d Log}.v$$

comme les dérivées

$$\text{d Log}.C_a^{\alpha\beta}/\text{d Log}.v$$

et pour des causes semblables, restent à peu près constantes.

D'où découlent les expressions (18) où

$$\varphi_a^{\alpha\beta} = -\left(\frac{\partial \text{ Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\partial \text{ Log}.v}\right)_\Theta ; \quad \varphi_{ab}^{\alpha\beta\gamma} \simeq -\left(\frac{\partial \text{ Log}.D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}{\partial \text{ Log}.v}\right)_\Theta$$

$$\eta_a^{\alpha\beta}\delta = -\frac{1}{\beta C_b^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial \Theta}\right)_v ; \quad \eta_{ab}^{\alpha\beta\gamma}\delta \simeq -\frac{1}{\beta D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}\left(\frac{\partial D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}}{\partial \Theta}\right)_v$$

Les oscillations fondamentales sont entretenues par des forces de rappel qui, à des écarts minimes près, restent linéaires par rapport aux dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ (1-2). Négligeons ces écarts, et supposons les vecteurs $\mathbf{c}_{S\tau}$ constants, condition qui est aussi sensiblement réalisée. Compte tenu de la relation (21), nous obtenons :

$$\frac{\text{d Log}.\omega_{S\tau}}{\text{d Log}.v} = -\frac{1}{2}\,\frac{\sum_{\alpha\beta} c_{\alpha,S\tau}\, c_{\beta,S\tau} \sum_a C_{a_0}^{\alpha\beta}(\varphi_a^{\alpha\beta} + 2\eta_a^{\alpha\beta}\delta)\, e^{-(\varphi_a^{\alpha\beta}+\eta_a^{\alpha\beta}\delta)\delta} \sin^2 \pi.Sa}{\sum_{\alpha\beta} c_{\alpha,S\tau}\, c_{\beta,S\tau} \sum_a C_{a_0}^{\alpha\beta}\, e^{-(\varphi_a^{\alpha\beta}+\eta_a^{\alpha\beta}\delta)\delta} \sin^2 \pi Sa} \tag{67}$$

$$\eta_a^{\alpha\beta}\delta \ll \varphi_a^{\alpha\beta}.$$

Quand la température s'élève, les modules des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ ne décroissent pas uniformément ; donc chaque dérivée

$$\text{d Log}.\omega_{S\tau}/\text{d Log}.v$$

varie, et suivant une loi particulière (déterminée par S et τ). Mais seules importent les dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ qui portent sur des atomes voisins, et les exposants correspondants $(\varphi_a^{\alpha\beta} + \eta_a^{\alpha\beta}\delta)\delta$ n'atteignent que quelques dixièmes au point de fusion. De ce fait, entre le zéro absolu de la température et le point de fusion, les dérivées

$$\text{d Log}.\omega_{S\tau}/\text{d Log}.v$$

ne varient, en grandeur absolue, que dans une faible proportion (de quelques centièmes par rapport à leur module au zéro absolu de la température) ; et la dérivée moyenne (négative)

$$\frac{\text{d Log}.\omega}{\text{d Log}.v} = \frac{1}{3\mathcal{N}}\sum_{S\tau}\frac{\text{d Log}.\omega_{S\tau}}{\text{d Log}.v} \tag{68}$$

varie encore moins.

En conséquence, le facteur ξ/μ [1] (57) et le module de la dérivée d Log. ω/d Log. v (62) restent, à température variable, dans un rapport à peu près constant. Mais, comme les modules des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ et troisièmes $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$ ne diminuent pas uniformément à température croissante, il n'existe pas de relation simple entre le facteur $\frac{\xi}{\mu}$ et la dérivée d Log. ω/d Log. v.

De même que la dérivée moyenne $\frac{\text{d Log}.\omega}{\text{d Log}.v}$,

[1] Le facteur $\frac{\xi}{\mu}$ se confond avec la constante γ de Grüneisen [11].

et pour la même raison, du zéro absolu à la température de fusion, les dérivées (négatives)

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.c^{11}}{\mathrm{d\,Log}.v}, \quad \frac{\mathrm{d\,Log}.c^{12}}{\mathrm{d\,Log}.v}, \quad \frac{\mathrm{d\,Log}.c^{44}}{\mathrm{d\,Log}.v}$$

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.\Gamma}{\mathrm{d\,Log}.v} \qquad (69)$$

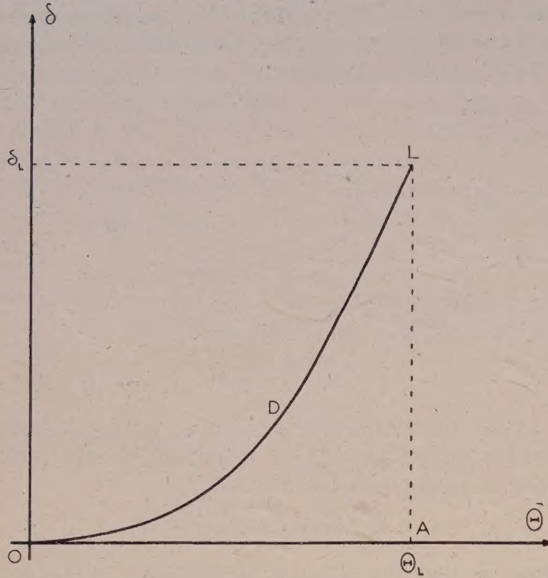


Fig. 8.

restent approximativement constantes (à quelques centièmes près) (1).

(1) Et à des écarts encore plus grands, on a :

$$\left|\frac{\mathrm{d\,Log}.\omega}{\mathrm{d\,Log}.v}\right| \simeq \frac{1}{2}\left|\frac{\mathrm{d\,Log}.\Gamma}{\mathrm{d\,Log}.v}\right| - \frac{1}{6}.$$

Toutes les dérivées (64-66-67-69) dont je viens de faire état se rapportent au milieu cristallin libre de toute contrainte, soit à l'évolution de ce milieu représentée par la courbe *ODL* (*fig.* 8) qui décrit la dilatation cubique $\delta(\Theta)$ (16) en fonction de la température, sous une pression nulle. Comme la dérivée (64)

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\mathrm{d\,Log}.v},$$

les dérivées

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.\omega}{\mathrm{d\,Log}.v}, \quad \frac{\mathrm{d\,Log}.c^{11}}{\mathrm{d\,Log}.v}, \ldots, \frac{\mathrm{d\,Log}.c^{44}}{\mathrm{d\,Log}.v} \qquad (67, 69)$$

peuvent être résolues en deux dérivées partielles, l'une telle que

$$\frac{1}{\beta C_a^{\alpha\beta}}\left(\frac{\partial C_a^{\alpha\beta}}{\partial\Theta}\right)_v$$

prise à volume constant par rapport à la température, l'autre telle que

$$\left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.C_a^{\alpha\beta}}{\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$$

prise à température constante par rapport à la dilatation (2).

(2) Dans le calcul de la dilatation je prends en compte les dérivées totales des pulsations ωs_τ et des facteurs $g s_\tau$, c'est-à-dire :

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.\omega s_\tau}{\mathrm{d\,Log}.v} = \frac{1}{\beta\omega s_\tau}\left(\frac{\mathrm{d}\omega s_\tau}{\partial\Theta}\right)_v + \left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.\omega s_\tau}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta$$

$$\frac{\mathrm{d\,Log}.g s_\tau}{\mathrm{d\,Log}.v} = \frac{1}{\beta g s_\tau}\left(\frac{\partial g s_\tau}{\partial\Theta}\right)_v + \left(\frac{\partial\,\mathrm{Log}.g s_\tau}{\partial\,\mathrm{Log}.v}\right)_\Theta.$$

Manuscrit reçu le 11 avril 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[11] Grüneisen (E.), *Ann. Physik*, 1912, **39**, 257 ; *Handbuch der Physik*, 1926, X, 1.

INTENSITÉS RELATIVES DES RAIES X DU SPECTRE L, EXCITÉ PAR BOMBARDEMENT ÉLECTRONIQUE, DES ÉLÉMENTS LOURDS.

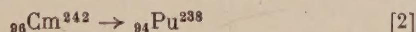
Par MARCEL GOLDBERG,
Institut du Radium. Laboratoire Curie, Paris.

Résumé. — On a mesuré les intensités relatives des raies X du spectre L des éléments suivants : Ta, W, Re, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Th, U. On a travaillé avec un tube à rayons X sous une tension de 50 kV. Les raies sont séparées par un spectrographe à cristal courbé (Cauchois) et détectées par un compteur à scintillation : NaI(Tl) + photo-multiplicateur. Les résultats sont corrigés pour tenir compte du pouvoir réflecteur du cristal et de l'absorption dans l'anticathode.

Abstract. — Relative intensities of L X-rays were measured for the following elements : Ta, W, Re, Pt, Au Hg, Tl, Pb, Bi, Th, U. A 50 kV X ray tube was used. To analyse the rays a bent-crystal spectrometer (Cauchois) and a NaI(Tl) scintillation counter + photomultiplier were employed. The results are corrected for crystal-reflecting power and target absorption.

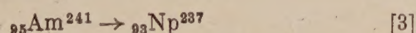
I. Introduction. — Nous avons repris l'étude des intensités relatives des raies X du spectre L dans la région des éléments lourds pour l'intérêt qu'elle peut présenter dans l'interprétation de certains phénomènes d'interaction noyau-cortège. Dans la conversion interne L par exemple la connaissance des rapports de conversion $L_{\rm I} : L_{\rm II} : L_{\rm III}$ permet d'assigner une nature et une multipolarité à la transition nucléaire. Expérimentalement on mesure $L_{\rm I} : L_{\rm II} : L_{\rm III}$ soit par spectroscopie β magnétique soit par spectroscopie des rayons X émis à la suite de l'ionisation des trois niveaux L. Cette dernière méthode est en particulier employée lorsque la transition nucléaire a une énergie peu supérieure aux énergies de liaison des électrons L, les électrons de conversion sont alors peu énergiques et leur étude est difficile.

Les rayons X des sources radioactives sont en général étudiés par absorption sélective ou à l'aide d'un compteur proportionnel ; on n'arrive alors qu'à séparer les trois groupes de raies du spectre L : α, β, γ. Dans quelques cas particuliers on a obtenu les spectres X par diffraction cristalline : conversion du rayonnement de 47 keV du RaD [1], spectre L de Pu et Np émis lors des désintégrations :



$${}_{96}\mathrm{Cm}^{242} \rightarrow {}_{94}\mathrm{Pu}^{238} \qquad [2]$$

et



$${}_{95}\mathrm{Am}^{241} \rightarrow {}_{93}\mathrm{Np}^{237} \qquad [3]$$

par exemple. Pour cela il faut une source intense, de plus le résultat n'est aisément interprétable que s'il n'y a qu'un seul rayonnement γ converti, c'est le cas du RaD. Dans les autres cas on est conduit à faire des coïncidences pour isoler les rayons X appartenant à la conversion d'un γ donné. On doit alors employer un compteur proportionnel. Il s'agit donc de pouvoir remonter de la connaissance des intensités relatives des groupes $\alpha : \beta : \gamma$ aux intensités relatives $X_{\rm I} : X_{\rm II} : X_{\rm III}$ des raies X des trois niveaux L. $X_{\rm I}$ est réparti dans β et γ, $X_{\rm II}$ également (plus η qui se trouve entre α et β), $X_{\rm III}$ dans α et β (plus quelques raies peu intenses l, s, t). Ces répartitions sont indépendantes du mode d'excitation du cortège. Elles peuvent donc être étudiées par le moyen le plus commode, le bombardement électronique et la spectrographie cristalline des raies. Un autre problème est de passer de $X_{\rm I} : X_{\rm II} : X_{\rm III}$ à $L_{\rm I} : L_{\rm II} : L_{\rm III}$ (ionisations relatives primaires). Il n'est pas aisé de le résoudre dans la région des Z qui nous intéresse car, outre les rendements de fluorescence de chaque niveau, il faut connaître les probabilités de transitions Coster-Kronig [4]. Les transitions Coster-Kronig consistent pour le spectre L dans le passage de l'ionisation de la couche $L_{\rm I}$ à la couche $L_{\rm II}$ ou $L_{\rm III}$ ou de $L_{\rm II}$ à $L_{\rm III}$, l'énergie libérée servant à expulser un électron d'une autre couche $M . N$ ... Ces transitions ne sont énergétiquement possibles que pour certains éléments. $L_{\rm I} \rightarrow L_{\rm III}\, M_{\rm IV}$ par exemple ne se produit que si :

$$E_{L_{\rm I}} - E_{L_{\rm III}} - E'_{M_{\rm IV}} > 0$$

($E'_{M_{\rm V}}$: énergie du niveau $M_{\rm IV}$ lorsque $L_{\rm III}$ est déjà ionisé).

C'est le cas pour les atomes de numéro atomique :

$$Z < 50 \qquad Z > 73.$$

Les rendements de fluorescence (ω_i) et les coefficients de passage Coster-Kronig (f_{ij}.) sont des caractéristiques du réarrangement du cortège électronique, indépendantes du mode d'excitation de ce dernier. La valeur des rapports $X_{\rm I} : X_{\rm II} : X_{\rm III}$ dans un mode d'excitation donné où $L_{\rm I} : L_{\rm II} : L_{\rm III}$ (rapports des probabilités d'ionisation) sont connus contribue à la détermination des ω_i et f_{ij}.

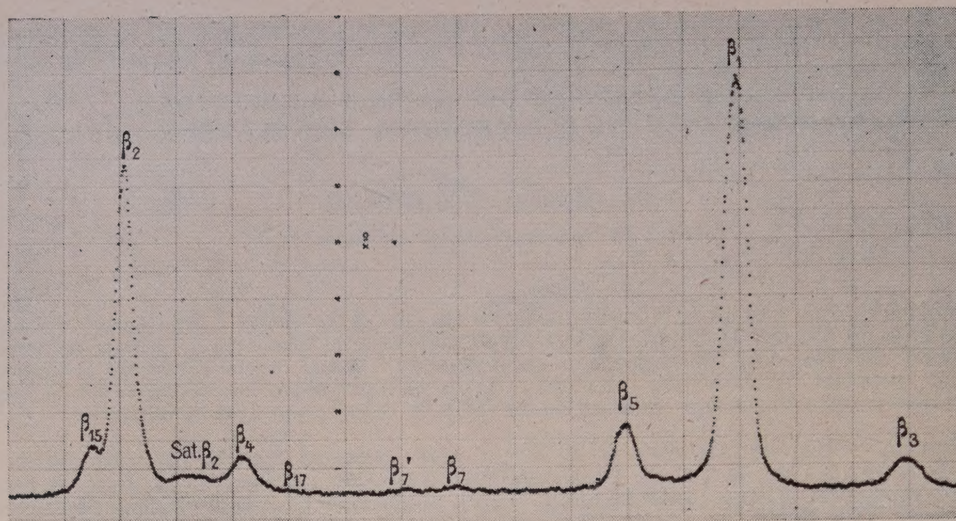


Fig. 1. — Raies $L\beta$ de l'uranium.

Les mesures d'intensités relatives des raies X du spectre L sont peu nombreuses. Les mesures anciennes [5] ont été faites par spectroscopie à cristal et détection photographique ou à l'aide d'une chambre d'ionisation. La méthode photographique ne permet de comparer correctement que des raies de longueurs d'onde et d'intensités voisines. Vu la durée des mesures d'intensités, les chambres d'ionisations sont trop peu stables. Récemment Victor [6] a mesuré les intensités relatives des raies du spectre L pour les corps suivants : W, Pt, Au, Pb, Bi, Th et U, en se servant d'un compteur proportionnel comme détecteur.

II. **Montage expérimental.** — *a*) Les rayons X sont produits dans un tube démontable avec fenêtre de béryllium. La tension utilisée est de 50 kV. On a toujours des électrons dont l'énergie est plus du double de l'énergie d'ionisation des niveaux L des éléments étudiés (E_{L_I} ($_{92}$U) $= 21{,}756$ keV).

On peut obtenir une intensité d'électrons allant jusqu'à 25 mA. Les cibles sont constituées par des dépôts électrolytiques au tampon (procédé Dalic) sauf pour Ta, W, Th et U où des pastilles ont été soudées après avoir été recouvertes de cuivre dans un four à vide. Dans tous les cas les cibles sont épaisses, c'est-à-dire qu'elles absorbent complètement les électrons de 50 keV.

b) Les raies sont séparées par un spectromètre à cristal courbé à transmission (type Cauchois) [7], construit par M. Frilley [8]. C'est un cristal de mica de 12,5/100 mm d'épaisseur. Nous nous sommes servis des plans 100 dont la distance réticulaire est de 2,55 Å. Le rayon de courbure est de 40 cm ce qui donne une dispersion d'environ 12,5 UX/mm.

c) Le rayonnement est détecté par un compteur à scintillations INa(Tl) + photomultiplicateur 51 AVP, avec montage en impulsions. Les impulsions sont amplifiées puis passent par un sélecteur à un canal qui élimine en grande partie le bruit de fond du P. M. et les autres parasites. Elles sont ensuite transmises à un intégrateur relié à un enregistreur.

Le cristal scintillateur INa(Tl) a 2 mm d'épaisseur, il absorbe la quasi totalité du rayonnement, qui a dans nos expériences une énergie toujours inférieure à 21 keV. Il n'y a donc pas lieu de faire des corrections de rendement du compteur. Avec la stabilité c'est un des avantages de l'emploi de ce mode de détection.

Une fente portée par un chariot précède le détecteur. Les diverses positions de la fente correspondent aux différentes longueurs d'onde. L'ensemble de l'appareillage a été conçu pour obtenir un enregistrement continu et automatique des spectres.

La figure 1 donne un exemple de courbe expérimentale.

III. **Corrections.** — Pour comparer les intensités des diverses raies on a à tenir compte de plusieurs facteurs de correction.

a) L'absorption entre l'anticathode et le détecteur. Le rayonnement traverse la fenêtre de béryllium du tube à rayons X (14/100 mm), le cristal de mica (12,5/100 mm en négligeant la variation de parcours avec l'angle de Bragg), 50 cm d'air et la fenêtre du compteur en béryllium (1/10 mm).

b) Le pouvoir réflecteur du cristal est fonction de la longueur d'onde. Lind, West et Du Mond [9] ont vérifié qu'un cristal courbé se comportait comme un cristal mosaïque. Le pouvoir réflecteur est alors proportionnel au carré de la longueur d'onde.

c) Les électrons pénètrent dans la masse du métal et le rayonnement est produit jusqu'à une certaine profondeur à partir de la surface de l'anticathode. Le problème des corrections d'absorption dans l'anticathode est étudié dans le livre de Compton et Allison, p. 86 [6]. Le nombre de photons N_λ à la surface de l'anticathode est donné par la formule :

$$N_\lambda = A T_\lambda \int_{x_0}^{0} F[u(x)]\, \mathrm{e}^{-\mu_\lambda x \operatorname{cotg} \theta}\, \mathrm{d}x \qquad (1)$$

A est un facteur qui s'élimine lorsque l'on fait les rapports d'intensité de raies d'un même niveau ; T_λ probabilité de transition ; $F(u)$ fonction d'ionisation ; u rapport de l'énergie des électrons à l'énergie d'ionisation du niveau.

On prend u fonction de la pénétration des électrons : $u(x)$.

Nous avons établi cette fonction à partir des calculs de Tsien San Tsiang [10] des relations énergies-parcours des électrons.

x_0 est tel que $u(x_0) = 1$.

θ angle que font les rayons X avec la surface de l'anticathode.

TABLEAU I

			73 Ta	74 W	75 Re	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	90 Th	92 U
L_{III}	α_1	M_V	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
L_{III}	α_2	M_{IV}	12	11,7	11,7	11,8	11,5	11	10,5	11,9	11,3	10,7	10,6
L_{II}	η	M_I	1,1	1,1	0,8	0,9	0,8	1,1	0,9	1,1			0,9
L_{II}	β_1	M_{IV}	45,5	46,3	44,1	45,5	42,4	45,3	46,4	41,6	40,5	39,9	38,6
L_{III}	$\beta_{15} + \beta_2$	$N_{IV,V}$	20,2	22,2	21,4	23,2	25,9	22,9	26,8	22,4	24	28,4	26,8
L_I	β_3	M_{III}	8,6	6,7	6,1	4,7	4,7	5,7	4,5	4,8	4,3	3,4	3,7
L_I	β_4	M_{II}	6,5	5,3	4,4	3,7	3,6	3,8	4,3	4,3	4,1	**3,3	3,6
L_{III}	β_5	$O_{IV,V}$	0,28	0,25	0,53	1,7	2,1	2,3	3	3,2	4	**5,7	5,7
L_{III}	β_6	N_I	1,2	1,2	1,8	1,5	1,3	1,3	1,7	1,7	1,8	1,9	1,7
L_{III}	β_7	O_I	0,33	0,21		0,32	0,36	0,35	0,5	* 0,9	*1,1		0,42
L_{III}	β_7'	$N_{VI,VII}$		0,07			0,16						0,22
L_I	β_9	M_V	0,48	0,34	0,5	0,32	0,4		0,5				0,4
L_I	β_{10}	M_{IV}	0,26	0,3		0,27	0,3		0,3				0,25
L_{II}	γ_1	N_{IV}	9,6	12	12,6	14,7	13,9	13,3	13,7	12,8	11,6	12,2	10,8
L_I	γ_2	N_{II}	1,9	1,9	1,3	1,6	1,8	0,95	1,6	1,3	1,3	1,4	1,05
L_I	γ_3	N_{III}	3	2,8	2	2,2	2,3	1,5	1,8	1,6	1,7	1,75	1,15
L_I	$\gamma + \gamma_4$	O_{II}, O_{III}	0,78	0,83	0,7	1	1	1	0,9	0,7	0,6		0,77
L_{II}	γ_5	N_I	0,32	0,39	0,5	0,45	0,65	0,5	0,65	0,6	0,45		0,34
L_{II}	γ_6	O_{IV}	0,33	0,27	0,58	1	1,6	0,8	1,8	1,9	1,3	2,2	2,2
L_{II}	γ_8	O_I	0,16	0,06					0,28				

* $\beta_7 + \beta_7'$.
** Interpolé.

Nous avons pris pour fonction d'ionisation la fonction empirique de Webster, Hansen et Duveneck [11] :

$$F(u) = \text{constante} \times \frac{1}{u\left[\left(\dfrac{\pi}{2 \text{ arc } \cos\sqrt{1/u}}\right)^2 - 1\right]} \qquad (2)$$

Soient deux raies 1 et 2 d'un même niveau, C_1 et C_2 la valeur des intégrales de (1) qui leur correspondent. Le rapport d'intensité expérimental N_2/N_1 doit être corrigé par C_1/C_2. Dans le cas de raies provenant de niveaux différents on procède de la façon suivante :

Pour une raie donnée le rapport de l'intensité du rayonnement détecté à l'intensité du rayonnement produit dans la direction définie par 0 est égal à :

$$\frac{\int_{x0}^{0} F(u)\, e^{-\mu_\lambda x \cot g \Theta}\, dx}{\int_{x_0}^{0} F(u)\, dx} = \frac{C}{K} \qquad (3)$$

et on applique comme correction pour deux raies 1 et 2 ne provenant pas du même niveau :

$$C_1/C_2 \times K_2/K_1.$$

Les intégrales ont été calculées graphiquement. Nous avons travaillé avec un angle $\theta = 18°$.

TABLEAU II

			73 Ta	71 W	75 Re	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	90 Th	92 U
	M_{II}	β_4	76	79	72	79	77	67	95	90	95		97
	M_{III}	β_3	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
	M_{IV}	β_{10}	3	4,5		5,8	6,4		6,7				6,8
L_I	M_V	β_9	5,5	5,1	8,7	6,8	8,5		11				11
	N_{II}	γ_2	22	29	21	34	38	17	35	27	30	41	29
	N_{III}	γ_3	35	42,5	33	47	49	26	40	33	40	51	32
	O_{II}, O_{III}	$\gamma_4' + \gamma_4$	9	12	11,5	21	21	17	20	15	14		21
	M_I	η	2,4	2,4	1,8	2	1,9	2,4	1,9	2,6			2,3
	M_{IV}	β_1	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
	N_I	γ_5	0,7	0,84	1,1	1	1,5	1,1	1,4	1,4	1,1		0,9
L_{II}	N_{IV}	γ_1	21	26	28,5	32	33	29	30	31	29	30,5	28
	O_I	γ_8	0,35	0,13					0,6				
	O_{IV}	γ_6	0,7	0,6	1,3	2,2	3,8	1,8	3,9	4,6	3,2	5,5	5,7
	M_{IV}	α_2	12	11,7	11,7	11,8	11,5	11	10,5	11,9	11,3	10,7	10,6
	M_V	α_1	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
	N_I	β_6	1,2	1,2	1,8	1,5	1,3	1,3	1,7	1,7	1,8	1,9	1,7
L_{III}	$N_{IV.V}$	$\beta_{15} + \beta_2$	20,2	22,2	21,4	23,2	25,9	22,9	26,8	22,4	24	28,4	26,8
	$N_{VI.VII}$	β_7'		0,07			0,16						0,22
	O_I	β_7	0,33	0,21		0,32	0,36	0,35	0,5	*0,9	*1,1		0,42
	$O_{IV.V}$	β_5	0,28	0,25	0,53	1,7	2,1	2,3	3	3,2	4		5,7

A titre d'exemple nous donnons les corrections pour le rapport β_2/α_1

Z :	74	78	79	82	83	92
Corr. :	0,71	0,77	0,75	0,79	0,79	0,85.

Bien que très approximatives (hypothèse du parcours rectiligne des électrons, négligence de la fluorescence due au rayonnement continu, etc...) ces corrections améliorent les résultats. Des expériences faites avec différents angles montrent une concordance convenable. Les corrections sont particulièrement importantes quand on compare 2 raies se trouvant de part et d'autre d'une discontinuité d'absorption.

IV. **Résultats expérimentaux.** — Dans le tableau I nous donnons les intensités en pour cent de la raie α_1. Il s'agit ici de rapports de nombres de photons, certains auteurs [5] donnent pour les intensités relatives de tels rapports multipliés par les rapports de fréquences. L'intensité d'une raie comprend l'intensité de la raie de diagramme plus l'intensité des raies satellites lorsqu'elles existent. Dans le spectre L les raies satellites sont liées à la double ionisation qui suit un passage Coster-Kronig mais correspondent à la même transition que la raie principale. Les résultats sont donnés corrigés comme il a été indiqué au paragraphe 3.

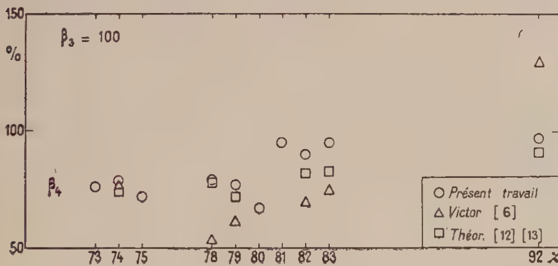


FIG. 2. — L_I β_4/β_3.

Les tableaux II donnent les résultats niveau par niveau. Les intensités sont rapportées à β_3, β_1, α_1 pour L_I, L_{II}, L_{III} respectivement. Nous obtenons les rapports des probabilités de réarrangement qui sont indépendants du mode d'ionisation.

Sur les figures nous portons avec nos valeurs, celles obtenues par Victor [6] ainsi que les résultats des calculs théoriques concernant les transitions $L \rightarrow M$ effectués par Massey et Burhop [12] pour Au et U et Laskar [13] pour W, Pt, Pb et Bi. Les divergences peuvent venir de l'imprécision due à à l'appareillage, de la façon dont on effectue les corrections et enfin de la manière dont on sépare les raies partiellement confondues comme β_2 et β_3 dans Pt et Au par exemple.

La figure 2 montre la variation du rapport β_4/β_3. Ces raies forment un doublet de spin. L'état initial étant le même, la règle de Burger et Dorgelo prévoit des intensités proportionnelles au poids statistique $(2j + 1)$ du niveau $M_{II}(p_{1/2})$ pour β_4 et M_{III} $(p_{3/2})$

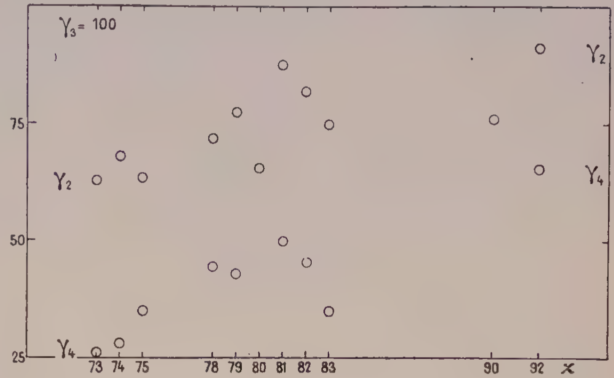


FIG. 3. — L_I γ_2/γ_3 et γ_4/γ_3.

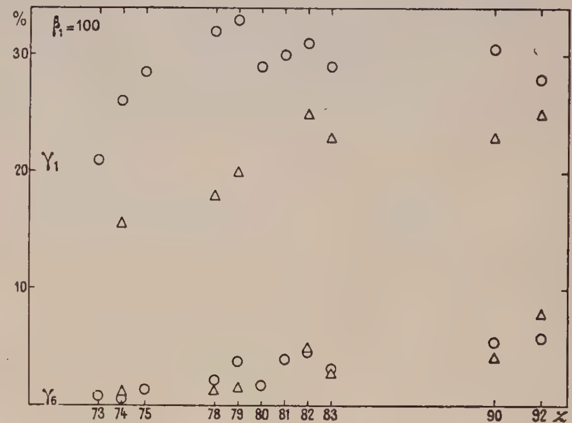


FIG. 4. — L_{II}.

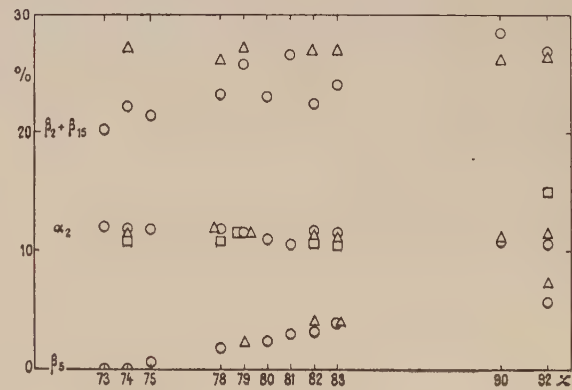


FIG. 5. — L_{III}.

pour β_3. On devrait avoir donc un rapport constant égal à 1/2. On voit que les résultats expérimentaux diffèrent nettement de cette valeur, par contre ils se rapprochent des valeurs obtenues par le calcul relativiste des intensités radiatives [12], [13]. On a

un exemple identique de doublet avec γ_2 et γ_3 ($L_I \to N_{II}$, N_{III}) (*fig.* 3).

Des autres figures notons que les rapports d'intensité des raies émises lors des transitions $L \to M$ et N varient peu, alors que les rapports γ_6/β_1 et β_5/α_1 sont de l'ordre de dix fois plus grands pour U que pour Ta. Ceci est lié au remplissage de la couche électronique externe O_{IV}, O_V dans l'état solide. Cette couche est complète à $Z = 79$ dans l'atome libre. La variation de γ_4/γ_3

$$\frac{(L_I \to O_{II}, O_{III})}{L_I \to N_{III}}$$

est moins prononcée, O_{II}, O_{III} est complète dans toute la région qui nous intéresse.

Les rapports des intensités totales rayonnées par chacun des niveaux $X_I : X_{II} : X_{III}$, qui dépendent des probabilités d'ionisation, des rendements de fluorescence et des coefficients de passage Coster-Kronig, seront analysés dans une publication ultérieure.

Ce travail a été effectué sous la direction de M. Frilley auquel je tiens à exprimer toute ma gratitude. Je remercie également Mme Blandin, du Laboratoire de l'Aimant Permanent, qui a effectué les dépôts sous vide.

Manuscrit reçu le 22 avril 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Frilley (M.), Gokhale (B.) et Valadares (M.), *C. R. Acad. Sci.*, 1951, **232**, 157.
[2] Barton (G. W.) Jr, Robinson (H. P.), Perlman (I.), *Phys. Rev.*, 1951, **81**, 208.
[3] Jaffe (H.), Passel (T. O.), Browne (C. I.) et Perlman (I.), *Phys. Rev.*, 1955, **97**, 142.
[4] Coster (D.), Kronig (L.), *Physica*, 1935, **2**, 13.
[5] Compton (A. H.), Allison (S. K.), X Rays in Theory and Experiment.
[6] Victor, Thèse Paris 1956, *Ann. Physique*, 1961, **6**, 183.
[7] Cauchois (Y.), *Ann. Physique*, 1934, **1**, 215.
[8] Frilley (M.), Gokhale (B.) et Valadares (M.), *C. R. Acad. Sci.*, 1951, **232**, 50.
[9] Lind (D. A.), West (W. J.), Dumond (J. W. M.), *Phys. Rev.*, 1950, **77**, 475.
[10] Tsien San Tsiang, *Ann. Physique*, 1944, **19**, 327.
[11] Webster, Hansen et Duveneck, *Phys., Rev.*, 1933, **43**, 839.
[12] Massey (H. S. W.) et Burhop (E. H. S.), *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1936, **32**, 461.
[13] Laskar (W.), *J. Physique Rad.*, 1955, **16**, 644 ; *Ann. Physique*, 1958, **3**, 258.

ERRATUM

Dans l'article de A. Meessen sur la « **Théorie de l'effet photoélectrique des métaux** », (*J. Physique Rad.*, 1961, **22**, 308), la figure 3 doit être corrigée en retournant les courbes expérimentales de Dickey, dont l'échelle d'énergie doit être E au lieu de $E_m - E$. Ceci a d'ailleurs pour effet de donner un accord bien meilleur avec la théorie et de rapprocher énormément les résultats expérimentaux de Dickey et de Methfessel. Nous remercions le Dr Methfessel d'avoir attiré notre attention sur cette erreur.

PROPAGATION D'UNE ONDE ÉLECTROMAGNÉTIQUE PLANE DANS UN PLASMA A LA COUPURE ET AU DELA

Par R. PAPOULAR,
Service de Fusion Controlée, C. E. N., Fontenay aux roses.

Résumé. — La solution complète des équations de Maxwell pour deux types de distributions de densité fait ressortir l'insuffisance des hypothèses de l'optique géométrique pour les plasmas minces : *a*) le coefficient de réflexion d'une couche de plasma n'est voisin de 1 que pour des fréquences inférieures à la fréquence nominale de coupure ; *b*) ces fréquences sont d'autant plus basses que l'épaisseur du plasma est plus faible ; *c*) le déphasage de l'onde réfléchie dépend de l'épaisseur du plasma aussi bien que de la fréquence de travail. Par contre dans certains cas (au moins), le déphasage de l'onde transmise est pratiquement le même que celui calculé en optique géométrique. Une relation générale entre l'amplitude et le déphasage du champ électromagnétique est démontrée en annexe.

Abstract. — The complete solution of Maxwell's equations for two typical density distributions makes clear the shortcomings of the geometrical-optics hypotheses for thin plasmas :
a) the reflection coefficient of a layer of plasma is very different from 1 unless the working frequency is lower than the nominal cut-off frequency and ;
b) the more so the thinner the layer ;
c) the phase lag of the reflected wave depends on the plasma thickness as well as on the working frequency. Nevertheless, in certain cases, at least, the phase lag of the transmitted wave is pratically the same as that which is deduced from geometrical optics. A general relation between amplitude and phase angle of the electromagnetic field is also proved an appendix.

I. Introduction. — L'une des méthodes les plus utilisées pour la mesure de la densité des gaz ionisés est celle de *l'interférométrie hertzienne.* Elle consiste a mesurer le déphasage subi par une onde plane traversant le volume ionisé ou se réfléchissant sur lui.

Pour interpréter le résultats de ces mesures, on considère habituellement que l'approximation de l'optique géométrique est valable, c'est-à-dire que la variation relative de l'indice de réfraction du milieu ionisé est faible pour un trajet égal à la longueur d'onde.

Or, il n'est pas rare de rencontrer dans les laboratoires, des plasmas de quelques centimètres d'épaisseur. D'autre part, les densités électroniques courantes étant comprises entre 10^{12} et 10^{14} cm^{-3}, les longueurs d'ondes les plus usitées en interférométrie sont 8 et 4 mm. Dans ces conditions, on ne peut admettre que la densité et l'indice soient très lentement variables, et il paraît utile d'analyser plus rigoureusement la propagation électromagnétique dans ces milieux.

Plusieurs auteurs se sont attaqués à ce problème dès le début des études sur *l'ionosphère.* C'est ainsi que Hartree (1931) a donné les solutions des équations de Maxwell et le déphasage de l'onde réfléchie dans certains cas particuliers (réflexion totale) et s'est surtout intéressé à des variations relativement lentes de la densité ionique. A sa suite, Wilkes (1940) étudia les ondes polarisées circulairement, avec une densité croissant suivant une loi parabolique.

Saha et Rai (1937), puis Deb (1940) ont étudié l'amplitude du coefficient de transmission de couches ionisées d'épaisseur finie mais grande, au voisinage de la fréquence de coupure (répartitions de densité triangulaire et parabolique). Un travail qui semble mal connu est celui d'Epstein (1930) lequel a donné une expression du coefficient de réflexion dans le cas d'une répartition en « cloche » sans restriction sur les deux paramètres définissant cette distribution. Toutefois, il ne s'est pas intéressé aux questions de phase, ni à celles de l'amplitude des champs dans la région ionisée. Tout récemment, Golant (1960) a cité des résultats obtenus par la méthode d'Epstein et concernant l'amplitude du coefficient de réflexion des plasmas minces. Enfin Budden (1957 et 1959) a mis au point une méthode de calcul matriciel numérique permettant de résoudre le problème le plus général à l'aide d'une machine à calculer.

Dans le présent travail, nous nous proposons d'étudier les coefficients de réflexion et transmission en amplitude et en phase ainsi que la répartition des champs dans la région ionisée, et ceci pour deux types de distribution de densité qui se rapprochent assez de la réalité.

Hypothèses : Pour faciliter les calculs, nous avons fait les hypothèses simplificatrices suivantes :

1) La densité électronique et, par conséquent l'indice de réfraction ne dépendent que d'une variable d'espace x, la propagation s'effectue le long de l'axe et le plasma est supposé illimité dans les directions y et z : *le problème est donc ramené à une dimension.* Cette hypothèse est justifiée par le fait que les interféromètres généralement utilisés sont

pratiquement des filtres d'ondes planes à cause de la directivité des aériens émetteurs et récepteurs.

2) *On ne tient pas compte du champ magnétique.* — Pratiquement, il y a toujours un champ magnétique perpendiculaire à x, mais le vecteur électrique de l'onde hyperfréquence peut être dirigé parallèlement à ce champ, auquel cas ce dernier n'intervient pas dans la propagation.

3) *On ne tient pas compte de la dissipation d'énergie par collisions* (conductibilité électrique nulle). Cette simplification est d'autant plus justifiée que le milieu est plus chaud et moins dense.

Pour résoudre le problème posé, il est également nécessaire de faire une hypothèse sur la répartition de la densité électronique en fonction de l'abscisse x. Nous considérerons *deux types de répartition* : le type *parabolique* et le type *trapézoïdal*.

II. Répartition parabolique.

— Il est certain que cette répartition n'est pas parfaitement réalisée dans la pratique ; toutefois, elle ne doit pas être très en défaut, tout au moins dans les régions centrales du plasma.

D'autre part, avec cette répartition, la solution rigoureuse des équations de Maxwell ne s'exprime au moyen de fonctions connues et tabulées que dans des cas particuliers. Parmi ceux-ci, nous ne considérerons que celui où la densité critique n_c correspondant à la fréquence de travail est égale à la densité maximum du plasma ; c'est ce que nous appellerons condition de *coupure nominale*. Nous prendrons, pour origine des x, l'abscisse de ce maximum.

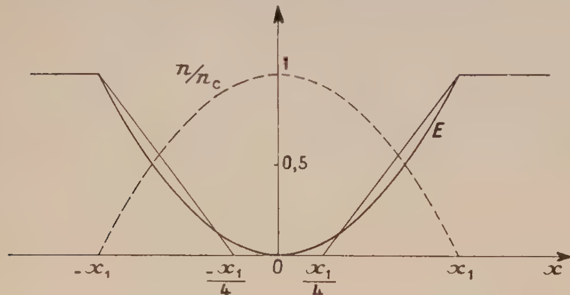


Fig. 1. — Densité et permittivité en fonction de la distance

On aura donc (voir aussi *fig.* 1) :
densité relative

$$n/n_c = 1 - (x/x_1)^2 \quad \text{pour} \quad -x_1 < x < x_1$$
$$= 0 \quad \text{pour } x < x_1 \text{ et } x > x_1$$

permittivité relative

$$\varepsilon = 1 - n/n_c = x^2/x_1^2$$

indice du plasma

$$i = \sqrt{\varepsilon} = x/x_1$$

indice du milieu environnant (vide) = 1.

L'hypothèse $n(0) = n_c$ *est à peu près réalisée*, chaque fois qu'on cherche à mesurer la fréquence de coupure d'un plasma donné.

II-1. Équations du problème et forme de la solution.

— Les champs électrique et magnétique sont de la forme

$$\mathcal{E} = E(x)\, e^{j\omega t} \quad \text{et} \quad \mathcal{H} = H(x)\, e^{j\omega t}.$$

Les équations de Maxwell en rotationnel deviennent

$$\frac{dE}{dx} = -j\omega\mu_0 H \tag{1}$$

$$\frac{dH}{dx} = -j\omega\varepsilon_0\, \varepsilon E \tag{2}$$

où μ_0 : perméabilité absolue du vide,
ε_0 permittivité absolue du vide,
ω : $2\pi f$,
f : fréquence de travail ($= f_c$, ici)
et d'où l'on tire

$$\frac{d^2 E}{dx^2} + \frac{\omega^2}{C^2}\varepsilon E = 0 \tag{3}$$

$$\frac{d^2 H}{dx^2} - \frac{1}{\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dx}\frac{dH}{dx} + \frac{\omega^2}{C^2}\varepsilon H = 0 \tag{4}$$

où $C = \dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$ vitesse de la lumière dans le vide.

Ces deux équations appartiennent à la même famille d'équations de Bessel.

$$y'' + \frac{a}{x}y' + bx^m y = 0. \tag{5}$$

Cette équation se ramène en effet à l'équation (3) si l'on fait

$$y \equiv E \qquad a \equiv 0$$
$$b \equiv \omega^2/C^2 x_1^2 = (k/x_1)^2 = (2\pi/\lambda x_1)^2 ; \qquad m \equiv 2$$

et à l'équation (4) si l'on y fait

$$y \equiv H \qquad a \equiv -2$$
$$b \equiv \omega^2/C^2 x_1^2 = (k/x_1)^2 = (2\pi/\lambda x_1)^2 \qquad m = 2.$$

Or, la solution générale de (5) est de la forme

$$y = x^{\frac{1-a}{2}}\, B_{\frac{1-a}{m+2}}\left[\frac{2\sqrt{b}}{m+2}\, x^{\frac{m+2}{2}}\right]$$

où B est une combinaison linéaire de deux fonctions de Bessel linéairement indépendantes. Or dans le cas présent, l'ordre de ces fonctions est $\nu = (1-a)/(m+2) = 1/4$ ou $3/4$ selon qu'il s'agisse de la solution de (3) ou de (4). Comme ces nombres ne sont pas des entiers, on peut prendre

$$B_\nu = MJ_\nu + NJ_{-\nu}$$

car alors les fonctions J_ν et $J_{-\nu}$ sont linéairement indépendantes.

Posons donc $Z = (\sqrt{b}/2)\, x^2$ = argument des fonctions de Bessel

$$E = x^{1/2}[MJ_{1/4}(Z) - NJ_{-1/4}(Z)]$$
$$= 2^{1/4}\, b^{-1/8}\, Z^{1/4}[MJ_{1/4}(Z) - NJ_{-1/4}(Z)] \quad (6)$$

$$H = x^{3/2}[PJ_{3/4}(Z) - QJ_{-3/4}(Z)]$$
$$= 2^{3/4}\, b^{-3/8}\, Z^{3/4}[PJ_{3/4}(Z) - QJ_{-3/4}(Z)]. \quad (7)$$

Portons maintenant (6) et (7) dans (1), en tenant compte des relations

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Z}(Z^{1/4}\, J_{1/4}) = Z^{1/4}\, J_{-3/4}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Z} Z^{1/4}\, J_{-1/4}) = -Z^{1/4}\, J_{3/4}$$

ainsi que de

$$\mathrm{d}x = 2^{-1/2}\, b^{-1/4}\, Z^{-1/2}\, \mathrm{d}Z.$$

Il vient

$$P = \frac{j}{\omega\mu_0}\sqrt{b}\, N \qquad Q = -j\frac{\sqrt{b}}{\omega\mu_0} M$$

D'où

$$H = j\frac{\sqrt{b}}{\omega\mu_0} x^{3/2}[NJ_{3/4}(Z) + MJ_{-3/4}(Z)]$$
$$j = \frac{2^{3/4}}{\omega\mu_0} b^{1/8}\, Z^{3/4}[NJ_{3/4}(Z) + MJ_{-3/4}(Z)]. \quad (8)$$

Tout ceci n'est valable que pour $x > 0$.

Pour $x < 0$, posons $x = -X$ avec $X > 0$. Les signes « moins » disparaissent dans (1) et (2) mais (3) et (4) ne changent pas de forme.

Si l'on pose $Z = (\sqrt{b}/2)\, X^2$, on trouvera pour E et H des solutions de la forme

$$E_- = 2^{1/4}\, b^{-1/8}\, Z^{1/4}[M_-\, J_{1/4} - N_-\, J_{-1/4}]$$

$$H_- = -2^{3/4}\frac{j}{\omega\mu_0} b^{1/8}\, Z^{3/4}[N_-\, J_{3/4} + M_-\, J_{-3/4}]$$

qui sont de la même forme que (6) et (8), au signe près de H.

Or, ces solutions doivent se raccorder aux précédentes pour

$$x = X = Z = 0\,; \quad \text{c'est-à-dire :}$$

$$E_-(0) = E(0) \quad (9)$$

et

$$H_-(0) = H(0).$$

Mais on sait (Jahnke-Emde-Loch, 1960, p. 134) que

$$J_\nu(Z) = \frac{(Z/3)^\nu}{0!\,\Gamma(\nu+1)} - \frac{(Z/2)^{\nu+2}}{1!\,\Gamma(\nu+2)} + \dots$$

Il en résulte que

$$\lim_{Z\to 0} J_{1/4}(Z) = \lim_{Z\to 0} J_{3/4}(Z) = 0$$

$$\lim_{Z\to 0} Z^{1/4}\, J_{-1/4}(Z) = \frac{2^{1/4}}{0!\,\Gamma(3/4)} = 0{,}975$$

$$\lim_{Z\to 0} Z^{3/4}\, J_{-3/4}(Z) = \frac{2^{3/4}}{0!\,\Gamma(1/4)} = 0{,}422.$$

Les densités (9) donnent alors

$$M_- = -M \quad \text{et} \quad N_- = N.$$

Finalement, on peut prendre

$$E_-(X) = -2^{1/4}\, b^{-1/8}\, Z^{1/4}[MJ_{1/4}(Z) + NJ_{-1/4}(Z)] \quad (10)$$

$$H_-(X) = -2^{3/4}\frac{jb^{1/8}}{\omega\mu_0} Z^{3/4}[NJ_{3/4}(Z) - MJ_{-3/4}(Z)] \quad (11)$$

Les deux constantes M et N seront déterminées par les conditions aux limites, c'est-à-dire, en l'occurence, l'onde incidente, E_i, au plan d'abscisse $-x_1$ et la présence du vide de part et d'autre du plasma.

II-2. Coefficient de réflexion. — Pour connaître le coefficient de réflexion du plasma il est utile de calculer d'abord « l'impédance »

$$z(-x_1) = E(-x_1)/H(-x_1)$$

présentée *par* le plasma dans le plan $-x_1$.

Dans ce but, écrivons que l'impédance présentée *au* plasma dans le plan $+x_1$ est celle du vide, c'est-à-dire

$z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$. Pour $x = x_1$, $Z = kx_1/2 = \pi x_1/\lambda = Z_1$.

D'où en utilisant (6) et (8) et posant $N/M = S$,

$$z(x_1) = -jz_0\frac{[J_{1/4}(Z_1) - SJ_{-1/4}(Z_1)]}{SJ_{3/4}(Z_1) + J_{-3/4}(Z_1)}.$$

On en tire

$$S = \frac{J_{-3/4}(Z_1) + jJ_{1/4}(Z_1)}{-J_{3/4}(Z_1) + jJ_{-1/4}(Z_1)}.$$

En portant cette valeur dans (10) et (11) on obtient

$$\boxed{z(-x_1) = z_0\frac{2J_{1/4}\, J_{-1/4} + j(J_{1/4}\, J_{3/4} - J_{-1/4}\, J_{-3/4})}{2J_{3/4}\, J_{-3/4} + j(J_{1/4}\, J_{3/4} - J_{-1/4}\, J_{-3/4})}} \quad (12)$$

où l'argument des fonctions J est toujours Z_1.

Le coefficient de réflexion (en amplitude) s'obtient par la formule bien connue

$$\rho = \frac{z(-x_1) - z_0}{z(-x_1) + z_0} = r\,\mathrm{e}^{-j\varphi}.$$

On trouve

$$\rho = \frac{J_{1/4}\, J_{-1/4} - J_{3/4}\, J_{-3/4}}{J_{1/4}\, J_{-1/4} + J_{3/4}\, J_{-3/4} + j(J_{1/4}\, J_{3/4} - J_{-1/4}\, J_{-3/4})}.$$

Les expressions asymptotiques de r et φ s'ob-

tiennent aisément à partir de celles des fonctions de Bessel.

$$\lim_{Z\to\infty} J_{1/4}(Z) = \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z - \frac{3}{4}\frac{\pi}{2}\right)$$

$$J_{-1/4}(Z) = \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z - \frac{1}{4}\frac{\pi}{2}\right)$$

$$J_{3/4}(Z) = \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z - \frac{5}{5}\frac{\pi}{2}\right)$$

$$J_{-3/4}(Z) = \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z + \frac{1}{4}\frac{\pi}{2}\right)$$

On trouve alors

$$\boxed{\lim_{Z_1\to\infty} \rho = (1/\sqrt{2})\, e^{-j(2Z_1-\pi/2)}} \qquad (14)$$

et

$$\lim_{Z_1\to\infty} \rho = 0 . e^{j\pi/2}.$$

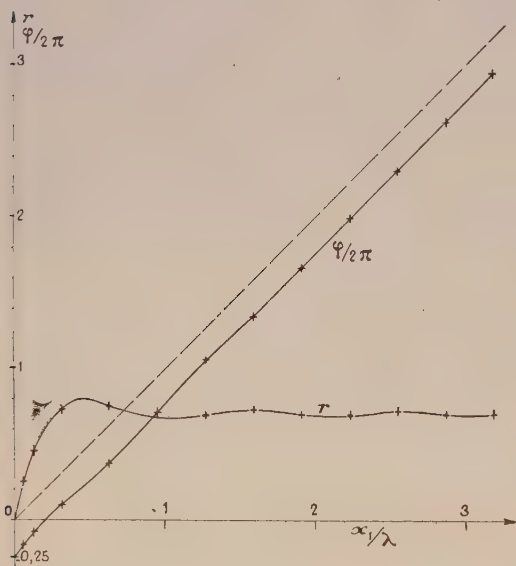


FIG. 2. — Coefficient de réflexion $\rho = r\, e^{-j\varphi}$ en amplitude.

La figure 2 représente les variations du module r et de l'argument φ du coefficient de réflexion. Ces résultats montrent que :

1. Même lorsque la densité maximum du plasma atteint la valeur critique correspondant à la fréquence de travail, *l'onde incidente n'est pas entièrement réfléchie. La moitié de la « puissance incidente » traverse encore le plasma*, même si ce dernier est très épais. Naturellement le coefficient de réflexion tend vers zéro en même temps que l'épaisseur du plasma.

2. *A un déphasage près de $\pi/2$ en avant, la phase φ de l'onde réfléchie par rapport à l'onde incidente a la même valeur que si la réflexion était localisée dans le plan médian $x = 0$ et si les lois de l'optique géométrique étaient encore valables.*

En effet dans l'approximation de l'optique géométrique, le retard de phase de l'onde réfléchie par rapport à l'onde incidente, dans le plan $-x_1$, est,

$$(2\pi/\lambda)\,(2\int_{-x_1}^{0} i\, dx) = 2\pi x_1/\lambda = 2Z_1.$$

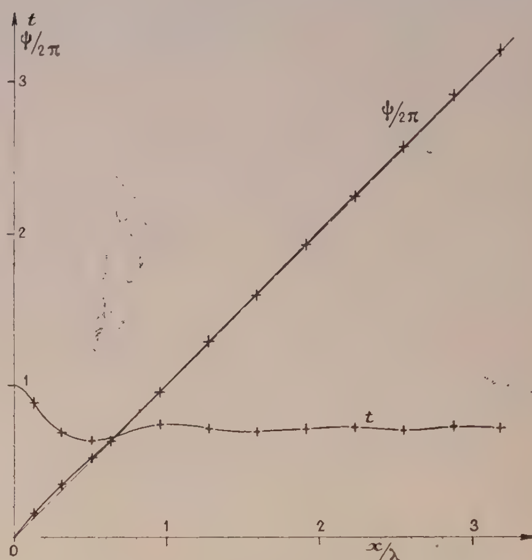


FIG. 3. — Coefficient de transmission en amplitude $\tau = t\, e^{-j\psi}$

La figure 2 montre que, aux erreurs de calcul près, la relation

$$\varphi = 2Z_1 - \pi/2$$

est valable non seulement pour les grandes valeurs de x_1/λ mais pour *toutes ses valeurs*.

II-3. COEFFICIENT DE TRANSMISSION. — Si l'on désigne par E_i, l'onde progressive incidente en $x = -x_1$, par $E(-Z_1)$ celle qui résulte de la composition des ondes incidente et réfléchie, en $x = x_1$, et enfin par $E(Z_1)$, l'onde transmise au delà du plasma, en $x = x_1$, le coefficient de transmission en amplitude est

$$\tau = t\, e^{-j\psi} = E(x_1)/E_i = (E(x_1)/E(-x_1)).(E(-x_1)/E_i).$$

Mais

$$E(-x_1)/E_i = 1 + \rho(-x_1)$$

par définition. Et, d'après (6) et (10)

$$\frac{E(x_1)}{E(-x_1)} = -\frac{J_{1/4}(Z_1) - SJ_{-1/4}(Z_1)}{J_{1/4}(Z_1) + SJ_{-1/4}(Z_1)}.$$

En substituant la valeur trouvée précédemment pour S, on obtient finalement

$$\boxed{\tau = \frac{+P}{\sqrt{T^2 + U^2}}\, e^{-j[(\pi/2) + \operatorname{Arc\,tg.}(U/T)]}} \qquad (15)$$

où

$$P = J_{1/4}\, J_{3/4} \;\; + J_{-1/4}\, J_{3/4}$$
$$T = J_{1/4}\, J_{-1/4} + J_{3/4}\, J_{-3/4}$$
$$U = J_{1/4}\, J_{3/4} \;\; + J_{-1/4}\, J_{-3/4} ;$$

argument des fonctions $J : Z_1$,

Il est facile de vérifier le principe de conservation de l'énergie

$$r^2 + t^2 = 1.$$

D'autre part,

et
$$\boxed{\lim_{Z_1 \to \infty} \tau = (1/\sqrt{2})\, e^{-j2Z_1}}. \qquad (16)$$

La figure 3 représente les variations du module t et de l'argument ψ du coefficient de transmission.

Là encore, on constate que l'expression

$$\psi = 2Z_1$$

du déphasage de l'onde transmise obtenue en optique géométrique est pratiquement valable pour toutes les valeurs du paramètre $Z_1 = \pi x_1/\lambda$, sauf peut-être pour $x_1/\lambda < 0{,}5$.

II-4. Variations du vecteur électrique a travers le plasma. — Prenons comme référence le vecteur $E(0)$, dans le plan $x = 0$

$$E(0) = -\, 2^{1/4}\, b^{-1/8} \cdot \frac{2^{1/4}}{\Gamma(3/4)} \cdot M . S$$

où S a la valeur calculée plus haut ; d'où

$$\frac{E(x)}{E(0)} = \frac{Z^{1/4}(J_{1/4} - S J_{-1/4})}{-\dfrac{2^{1/4}}{\Gamma(3/4)}\, S}$$

$$= 1{,}03\, Z^{1/4} \left(J_{-1/4} - \frac{J_{1/4}}{S}\right) \text{ pour } x > 0 \qquad (17)$$

et

$$E(x)/E(0) = 1{,}03\, Z^{1/4}\, (J_{-1/4} + J_{1/4}/S) \text{ pour } x < 0. \qquad (18)$$

La figure 4 représente les variations de la phase du vecteur électrique à travers un plasma « à la coupure nominale », d'épaisseur 4λ. Pour $x < -2\lambda$ et $x > 2\lambda$, la phase varie suivant des lois bien connues correspondant respectivement aux cas d'une onde réfléchie superposée à une onde plane et au cas d'une onde progressive seule. Il est difficile de parler d'ondes transmises et réfléchies dans un milieu d'indice variant rapidement. Toutefois, il est remarquable que pour $x > 0$, la phase varie sensiblement comme pour une onde *progressive* traversant un milieu d'indice lentement variable (courbe en pointillé).

Au contraire, pour $x < 0$, on retrouve les oscillations de phase caractéristiques *des ondes stationnaires* comme si, dans cette région, se superposaient une onde incidente et une onde réfléchie en $x = 0$ (ou autour de ce plan). On notera que la période spatiale des « oscillations » varie, en gros, proportionnellement à l'inverse de l'indice moyen du plasma.

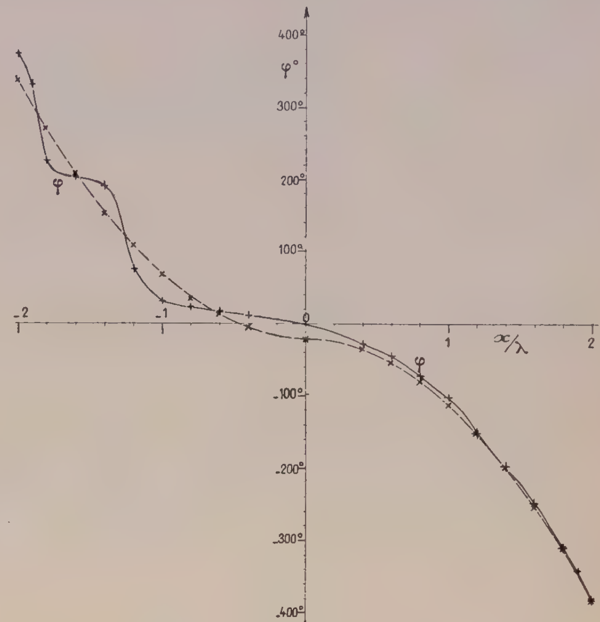


Fig. 4. — Phase du vecteur électrique complexe $E(x)$ dans un plasma parabolique, d'épaisseur 4λ « à la coupure ». L'origine des phases est définie par le vecteur $E(0)$. La courbe pointillé représente les variations de phase de l'onde incidente dans l'hypothèse de l'optique géométrique.

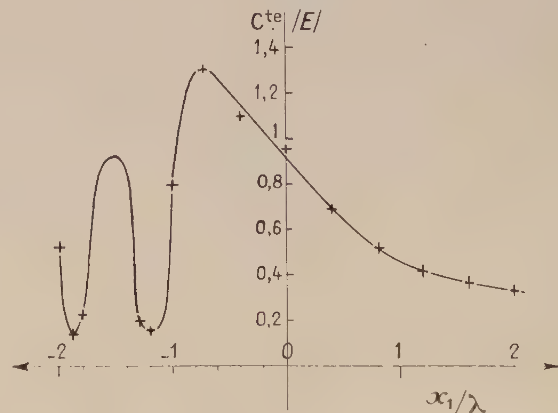


Fig. 5. — Allure des variations de l'amplitude $|E(x)|$, déduite de la relation (19).

Pour finir disons quelques mots des *variations de l'amplitude de* $E(x)$. On peut évidemment les déduire des relations (17) et (18). Mais on peut également en connaître rapidement l'allure en se basant sur une relation générale, démontrée en annexe, pour la propagation des ondes planes dans les milieux d'indices variables.

$$|E(x)|^2 = C^{te}\, (d\varphi/dx)^{-1}. \qquad (19)$$

Cette formule a été utilisée pour dessiner la figure 5, qui rappelle les variations de la densité de probabilité d'une particule à travers un mur de potentiel.

III. **Répartition trapézoïdale..** — Comme le montre la figure 1, la répartition trapézoïdale de bases $2x_1$ et $x_1/2$ est une *assez bonne approximation de la* répartition parabolique et, partant, de la distribution la plus courante de la densité électronique. Elle a aussi l'avantage *de se laisser traiter de façon rigoureuse* et, enfin, *la méthode d'analyse dont elle est justiciable peut s'étendre à une distibution quelconque, laquelle peut être toujours représentée par un nombre aussi grand que l'on veut de segments de droite, où si l'on veut, de trapèzes superposés.*

III-1. Équations du problème et forme de la solution. — Quelque soit le segment représentatif de la courbe de l'indice dans un intervalle donné, on pourra toujours, grâce à un changement convenable de l'origine, se ramener au cas d'un segment porté par une droite passant par l'origine, donc d'équation

$$\varepsilon = Ax.$$

Les équations à résoudre deviennent

$$\frac{\mathrm{d}^2 E}{\mathrm{d}x^2} + k^2 AxE = 0 \qquad (20)$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = - j\omega\mu_0 H. \qquad (21)$$

Cinq cas peuvent se présenter selon les valeurs de x et A, en supposant que *l'énergie se propage toujours dans la direction des $x > 0$.*

III-1-1) $A > 0, x > 0$ (*fig.* 6.1).
En se reportant à la solution de l'équation (5) et en posant $k^2 A = b$ on obtient

$$E = x^{1/2} B_{1/3}[(2/3)\sqrt{b}\, x^{3/2}]$$
$$= \gamma Z^{1/3}[M.J_{1/3}(Z) - N.J_{-1/3}(Z)]$$

où

$$\gamma = (3/2)^{1/3} b^{-1/6} = (3/2)^{1/3} k^{-1/3} A^{-1/6} \qquad (22)$$

et

$$Z = (2/3)\, b^{1/2} x^{3/2} = 2/3\, kA^{1/2} x^{3/2}.$$

M et N sont des coefficients qui dépendent des conditions aux limites. Des manipulations analogues aux précédentes conduisent à

$$H = j\delta[N.J_{2/3}(Z) + M.J_{-2/3}(Z)]$$

où

$$\delta = (3/2)^{2/3} b^{1/6}/\omega\mu_0 = (3/2)^{2/3} k^{+1/3} A^{+1/6}/\omega\mu_0. \qquad (23)$$

Notons que

$$\gamma/\delta = (3/2)^{-1/3} (k/A)^{1/3} z_0$$

où

$$z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}, \quad \text{impédance du vide}$$

Les relations (22) et (23) peuvent se mettre sous la forme

$$\begin{pmatrix}E\\H\end{pmatrix} = Z^{1/3}\begin{pmatrix}\gamma J_{1/3} & -\gamma J_{-1/3}\\ jZ^{1/3}\delta J_{-2/3} & jZ^{1/3}\delta J_{2/3}\end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix}M\\N\end{pmatrix} = Q_1(Z)\begin{pmatrix}M\\N\end{pmatrix} \qquad (24)$$

où l'argument des fonctions J est naturellement Z et où $Q_1(Z)$ est *la matrice de transfert du segment*

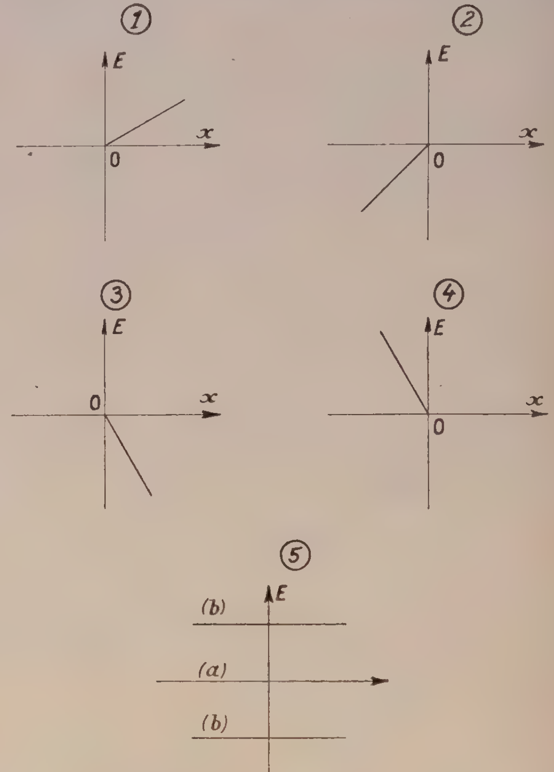


Fig. 6. — Segments représentatifs de la permittivité ε.

considéré. Si les extrémités du segment considéré sont désignées par les indices m et n, on aura,

$$\begin{pmatrix}E_m\\H_m\end{pmatrix} = Q_{1m} \times Q_{1n}^{-1} \times \begin{pmatrix}E_m\\H_n\end{pmatrix}.$$

III-1-2) $A > 0, x < 0$ (*fig.* 6.2).
Posons $X = -x > 0$. Les équations (20) et (21) deviennent

$$\frac{\mathrm{d}^2 E}{\mathrm{d}X^2} = (-k^2 A)\, XE = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}X} = j\omega_0\mu\, H.$$

En posant $\beta = -b > 0$ on voit que la solution pour E est une fonction de Bessel modifiée

$$I_{\pm 1/3}(Z) = j^{\pm 1/3} J_{\pm 1/3}(jZ)$$

où cette fois,

$$Z = (2/3)\sqrt{\beta}\, X^{3/2} = (2/3)\, kA^{1/2} X^{3/2}.$$

Rappelons que

$$\frac{dI_{1/3}}{dZ} = \frac{1}{Z}(-I_{1/3}/3 + ZI_{2/3})$$

et

$$\frac{dI_{-1/3}}{dZ} = \frac{1}{Z}(-I_{-1/3}/3 + ZI_{2/3}).$$

La matrice de transfert du segment est alors donnée par

$$Q_2(Z) \equiv Z^{1/3}\begin{pmatrix} \gamma I_{1/3} & -\gamma I_{-1/3} \\ -j\delta Z^{1/3} I_{-2/3} & j\delta Z^{1/3} I_{2/3} \end{pmatrix} \quad (25)$$

III-1-3) $A < 0, x > 0$ (*fig.* 6.3).
La transformation $\beta = -b = -k^2 A > 0$ conduit à la matrice de transfert

$$Q_3(Z) \equiv Z^{1/3}\begin{pmatrix} \gamma I_{1/3} & -\gamma I_{-1/3} \\ j\delta Z^{1/3} I_{-2/3} & -j\delta Z^{1/3} I_{2/3} \end{pmatrix} \quad (26)$$

où l'argument des fonctions I est

$$Z = \frac{2}{3}\sqrt{\beta}\, x^{3/2} = \frac{2}{3}\, k|A|^{1/2}\, x^{3/2}$$

et où $|A|$ remplace A dans les expressions (22) et (23) de γ et δ.

III-1-4) $A < 0, x < 0$ (*fig.* 6.4).
La transformation $X = -x > 0$ conduit à la matrice

$$Q_4(Z) \equiv Z^{1/3}\begin{pmatrix} \gamma J_{1/3} & -\gamma J_{-1/3} \\ -j\delta Z^{1/3} J_{-2/3} & -j\delta Z^{1/3} J_{2/3} \end{pmatrix} \quad (27)$$

où l'argument des fonctions J est

$$Z = \frac{2}{3}\, k|A|^{1/2}\, X^{3/2}$$

et où $|A|$ remplace A dans les expressions (22) et (23)

III-1-5) $A = 0$.
a) $\varepsilon = 0$ (*fig.* 6.5*a*). — Les équations (20) et (21) donnent

$$E = Mx + N$$
$$H = jM/\omega\mu_0.$$

La matrice de transfert est ici

$$Q_{5a} \equiv \begin{pmatrix} x & 1 \\ \dfrac{j}{\omega\mu_0} & 0 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

b) $\varepsilon = B = C^{te} \neq 0$ (*fig.* 6.5*b*).
Si l'on pose $\alpha^2 = -k^2 B$ on trouve aisément

$$E = M\,e^{\alpha x} + N\,e^{-\alpha x}$$

$$H = \frac{j\alpha}{\omega\mu_0}(M\,e^{\alpha x} - N\,e^{-\alpha x}).$$

La matrice de transfert devient

$$Q_{5b} \equiv \begin{pmatrix} e^{\alpha x} & e^{-\alpha x} \\ \dfrac{j\alpha}{\omega\mu_0}e^{\alpha x} & -\dfrac{j\alpha}{\omega\mu_0}e^{-\alpha x} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

III-2. Raccordement de deux segments de même pente. — *a*) Soient deux segments des types (1) et (2) respectivement. Quels sont les relations entre les coefficients M et N correspondants ? Les équations de raccordement (9) se traduisent sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} M_2 \\ N_2 \end{pmatrix} = [Q_2(0)]^{-1} \times \begin{pmatrix} E_2(0) \\ H_2(0) \end{pmatrix}$$
$$= [Q_2(0)]^{-1} \times [Q_1(0)] \times \begin{pmatrix} M_1 \\ N_1 \end{pmatrix}.$$

Mais d'après Jahnke-Emde, p. 207,

$$\lim_{Z\to 0} Z^{1/3} J_{-1/3}(Z) = \lim_{Z\to 0} Z^{1/3} I_{-1/3}(Z) = \mu \approx 0{,}93$$

$$\lim_{Z\to 0} Z^{2/3} J_{-2/3}(Z) = \lim_{Z\to 0} Z^{2/3} I_{-2/3}(Z) = \nu \approx 0{,}59.$$

On en tire

$$\begin{pmatrix} M_2 \\ N_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} M_1 \\ N_1 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

b) Si les segments sont des types (3) et (4) respectivement, on voit de la même manière que

$$\begin{pmatrix} M_4 \\ N_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} M_3 \\ N_3 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

III-3. Segments symétriques par rapport a l'axe $x = 0$. — L'énergie se propageant toujours de $-\infty$ à $+\infty$, soit $\mathcal{U}$ la matrice caractéristique qui, lie les vecteurs E_a, H_a, en amont, et E_b, H_b, en aval d'un segment donné :

$$\begin{pmatrix} E_a \\ H_a \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} E_b \\ H_b \end{pmatrix}.$$

Une relation analogue peut être écrite pour un segment symétrique du premier et que nous caractériserons par un signe prime. Il est démontré, dans l'annexe 2, que

$$\mathcal{U}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \times \mathcal{U}^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Si les deux segments symétriques sont adjacents et si

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

on trouve aisément la matrice caractéristique de l'ensemble :

$$\mathcal{U}_T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \mathcal{U}^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\mathcal{U} \quad (33)$$

$$= \begin{pmatrix} ad + bc & 2bc \\ 2ac & ad + bc \end{pmatrix}.$$

En tenant compte de la propriété bien connue des quadripoles : $|\mathcal{U}| = 1$.

Remarques : 1. Les calculs sont simplifiés par la règle suivante : l'inverse d'une matrice carrée de rang 2 s'obtient en inversant les positions des termes de la diagonale principale et en changeant seulement les signes des termes de la 2e diagonale,

puis en divisant tous les termes par le déterminant de la matrice initiale.

2. Les tables numériques des fonctions de Bessel se trouvent dans Jahnke-Emde-Lösch (1960) ou dans les références citées par ces auteurs ; voir en particulier les tables du National Bureau of Standards, New-York, 1948 et 1949, p. 413 et 365.

III-4. Répartition trapézoidale isocèle. — Ce cas est illustré par la figure 7 où l'on suppose

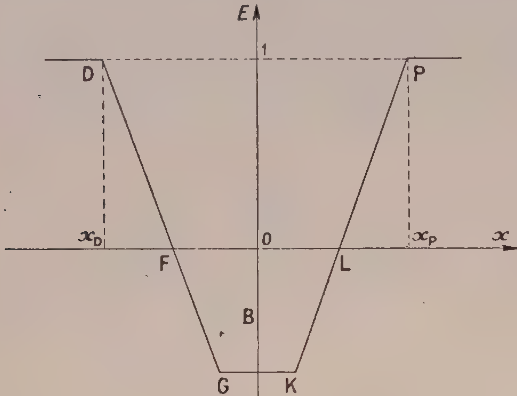


Fig. 7. — Répartition trapézoïdale isocèle.

que le vide règne en $x > x_1$ et en $x < x_1$ ($\varepsilon = 1$). *Cette répartition est entièrement définie par les paramètres x_1 et B.*

La matrice caractéristique $\mathcal{U}_P^D$ est donnée par la relation (33), ou $\mathcal{U}$ est la matrice caractéristique de la moitié gauche (par exemple), soit

$$U_0^D = Q_4(Z_D) \times Q_4^{-1}(0) \times Q_3(0) \times Q_3^{-1}(Z_G)$$
$$\times Q_5(\alpha x_G) \times Q_5^{-1}(0). \quad (34)$$

Les matrices Q_3, Q_4 et Q_5 sont données par (26), (27) et (29), respectivement ; d'après le § III-2 on peut poser

$$Q_3^{-1}(0) \times Q_3(0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Comme $|A| = \dfrac{4(1-B)}{3x_1}$, les arguments qui figurent dans (34) sont

$$Z_D = kx_1/2(1-B) \qquad Z_G = \frac{kx_1}{2(1-B)}|B|^{3/2}$$
$$\alpha x_G = -\sqrt{-Bkx_1/4}.$$

On voit que *tous les résultats peuvent être donnés en fonction des paramètres x_1/λ et B.*

Or la région GK est parcourue par une *onde incidente vers la droite* ($e^{-\alpha x}$) et une onde réfléchie vers la gauche ($e^{\alpha x}$). En toute rigueur, le plasma n'est donc jamais parfaitement opaque ; ce phénomène est évidemment analogue à l'effet « tunnel » de la mécanique quantique. Toutefois, dès que

$$\alpha x_1/2 = \pi\sqrt{-B}\,x_1/\gamma > 2{,}3, \qquad e^{\alpha x_1/2} < 0{,}1$$

et l'on peut admettre que

$$E_G/H_G = j\omega\mu_0/\alpha = jZ_0/\sqrt{-B},$$

en négligeant l'influence de la moitié droite du plasma et l'onde réfléchie en K (§ III-1-5*b*).

Il est important de remarquer *que cela ne peut se faire au voisinage de la fréquence de coupure nominale* ($B \gtrless 0$) *pour des plasmas d'épaisseur inférieure à la longueur d'onde de travail* (cf. Epstein).

Dans ce qui suit, nous admettrons, sauf indication expresse, que le plasma est assez épais et la fréquence de travail très inférieure à la fréquence de coupure nominale : ce sont les conditions d'un plasma parfaitement réfléchissant.

III-5. Plasma parfaitement réfléchissant. — Ce cas est illustré par la figure 8 où l'on suppose

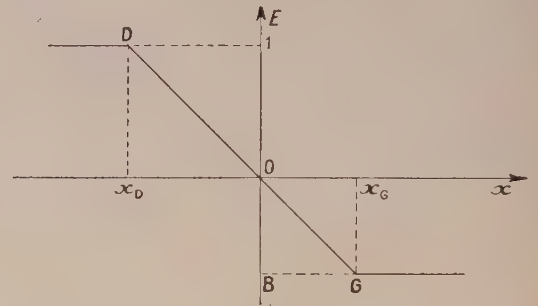


Fig. 8. — Plasma parfaitement réfléchissant.

que le vide règne en $x < x_D$ et où l'origine des abscisses a été prise dans le plan où la densité effective est égale à la densité critique correspondant à la fréquence de travail. La matrice caractéristique est alors donnée par

$$U_G^D = Q_4(Z_D) \times \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times Q_3^{-1}(Z_G)$$
$$= \left(\frac{Z_D Z_G^2}{\mu\nu}\right)^{1/3} \begin{pmatrix} a & \dfrac{jZ_0 b}{\sqrt{-B}} \\ \dfrac{c}{jZ_0} & \dfrac{d}{\sqrt{-B}} \end{pmatrix}$$

où

$$a = J_{1/3}(Z_D)\, I_{2/3}(Z_G) + J_{-1/3}(Z_D)\, I_{-2/3}(Z_G)$$
$$b = J_{1/3}(Z_D)\, I_{-1/3}(Z_G) + J_{-1/3}(Z_D)\, I_{1/3}(Z_G)$$
$$c = J_{-2/3}(Z_D)\, I_{2/3}(Z_G) - J_{2/3}(Z_D)\, I_{-2/3}(Z_G)$$
$$d = J_{-2/3}(Z_D)\, I_{-1/3}(Z_G) - J_{2/3}(Z_D)\, I_{1/3}(Z_G)$$
$$Z_D = \frac{2}{3}k\sqrt{|A|}\,x_D^{3/2} = \frac{4\pi}{3}\frac{x_D}{\lambda};$$
$$Z_G = \frac{2}{3}k\sqrt{|A|}\,x_G^{3/2} = \frac{4\pi}{3}\sqrt{-B}\,\frac{x_G}{\lambda} = \frac{4\pi}{3}(-B)^{3/2}\frac{x_D}{\lambda}$$

l'impédance présentée par le plasma au point D est alors

$$z_D = jz_0\frac{(a+b)}{(d+c)}$$

et le coefficient de réflexion, par conséquent

$$\rho_D = 1 \times e^{-j\varphi_D} = \frac{-(c+d)+j(a+b)}{(c+d)+j(a+b)}.$$

avec

$$\varphi_D = 2 \text{ arc tg} \frac{c+d}{a+b} \qquad (35)$$

De nombreux expérimentateurs mesurent l'angle de réflexion φ_D (retard de l'onde réfléchie par rapport à l'onde incidente en D) et ils en déduisent la distance DO $= x_D$. Il est donc intéressant de connaître la relation entre φ_D et x_D.

Quand $x_D/\lambda \to 0$ (transition rapide entre le vide et le plasma)

$$Z_D \text{ et } Z_G \to 0$$

et

$$J_\nu(Z) \text{ et } I_\nu(Z) \to \frac{1}{\Gamma(1+\nu)}\left(\frac{Z}{2}\right)^\nu$$

On en déduit

$$\lim_{x_D/\lambda \to 0} \varphi_D = -2 \text{ arc tg } (d/a) = -2 \text{ arc tg} \sqrt{-B}.$$

Ainsi, pour B variant de 0 à $-\infty$, la limite de φ_D varie entre O et $-\pi$. Elle est égale à $-\pi/2$ pour $B = -1$ $(f = f_c/\sqrt{2})$. On aboutit aux mêmes résultats en considérant la relation bien connue

$$z_D = z_G = jz_0/\sqrt{\varepsilon_G}$$

qui n'est valable que pour une transition brusque d'un milieu à un autre.

A l'autre extrême, quand $x_D/\lambda \to \infty$, Z_D et $Z_G = Z_D(-B)^{3/2}$ tendent vers l'infini (à moins que $B = 0$, coupure nominale)

$$\lim_{Z\to\infty} J_\nu(Z) = \sqrt{2/\pi Z} \cos \theta_\nu \quad \text{où} \quad \theta_\nu = Z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}$$

$$\lim_{Z\to\infty} I_\nu(Z) = \frac{e^Z}{\sqrt{2\pi Z}}.$$

Il en résulte que a et b tendent vers

$$\frac{e^Z}{\pi Z}(\cos \theta_{1/3} + \cos \theta_{-1/3}).$$

Tandis que c et d tendent vers

$$\frac{e^Z}{\pi Z}(\cos \theta_{-2/3} - \cos \theta_{2/3}).$$

d'où

$$\lim_{\frac{x_D}{\lambda}\to\infty} \varphi_D = -2 \text{ arc tg} \frac{c+d}{a+b}$$

$$= -2 \text{ arc tg} \frac{(\cos \theta_{-2/3} - \cos \theta_{2/3})}{(\cos \theta_{1/3} + \cos \theta_{-1/3})}$$

$$= 2Z_D - \frac{\pi}{2} \qquad (37)$$

Or, le retard de phase d'une onde qui, partant de D, se réfléchit en O sans changement de phase puis revient en D est

$$2 \times \frac{2\pi}{\lambda} \int_D^0 i \, dx = 2 \times \frac{2}{3} k \sqrt{|A|}\, x^{3/2} = 2Z_D.$$

Ce résultat est à rapprocher de celui du § II-2, équation (14).

Le raccordement entre les deux valeurs extrêmes (36) et (37) de φ_D se fait par une courbe sinueuse voir la *fig.* 9).

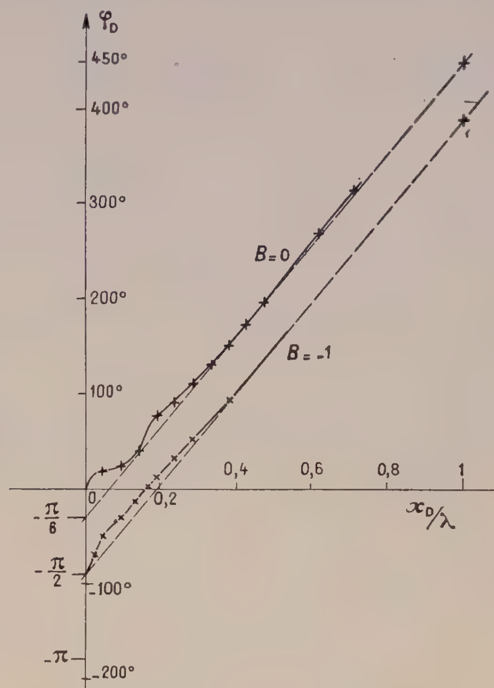


FIG. 9. — Retard de phase de l'onde réfléchie sur un plasma parfaitement réfléchissant. $B = \varepsilon_{\min}$

Cette courbe tend vers l'asymptote (37) d'autant plus rapidement que $|B|$ est plus grand : la différence entre la valeur réelle et la valeur asymptotique devient négligeable dès que Z_D et Z_G dépassent la valeur 2. Si $-B < 1$ il faut pour cela que

$$x_D/\lambda > \frac{3}{2\pi} \cdot \frac{1}{(-B)^{3/2}}. \qquad (38)$$

Par exemple, si $f_c/f = 1{,}2$, $B = -0{,}44$ et la condition (38) devient

$$x_D/\lambda > 1{,}6.$$

On voit que, pour des fréquences peu inférieures à f_c, le raccordement ne se fera que pour de grandes valeurs de x_D/λ. A la limite pour $f = f_c$, $B = 0$ le calcul montre que φ_D tend asymptotiquement vers

$$2Z_D - \pi/6 \qquad (39)$$

Ainsi, pour $-1 < B < 0$, φ se situe grossièrement entre les valeurs (37) et (39) *et ne dépend pas seulement de* x_D/λ.

ANNEXE 1

Relation entre la phase et l'amplitude d'une onde plane. — La solution de l'équation (13) de propa-

gation du champ électrique peut se mettre sous la forme

$$E(x) = E_0\, e^{\Phi(x)}$$

où Φ satisfait à la condition

$$\Phi'' + \Phi'^2 + k^2\, \varepsilon(x) = 0.$$

Posons $\Phi' = \alpha + j\beta$; l'équation précédente se subdivise en

$$\beta' + 2\alpha\beta = 0$$

et $$\alpha' + \alpha^2 - \beta^2 + k^2\, \varepsilon = 0$$

L'intégration de la première ce ces deux équations donne

$$\text{Log}\, (\beta/\beta_0) = -2 \int \alpha\, \mathrm{d}x$$

$$\beta\, e^{+2\int\alpha \mathrm{d}x} = \beta_0 = \text{C}^{\text{te}} \text{ d'intégration}$$

Mais

$$\beta = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\, [\mathfrak{Im}(\Phi)] = \mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}x$$

où $\varphi = \mathfrak{Im}[\Phi]$ est la phase de E au sens habituel du terme.

D'autre part,

$$\int \alpha\, \mathrm{d}x = \mathcal{R}e(\Phi)$$

et, par conséquent

$$e^{2\int\alpha \mathrm{d}x} = |E|^2/E_0^2$$

d'où

$$|E|^2 . \mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}x = \beta_0\, E_0^2 \qquad (19')$$

qui équivaut à (19). On peut généraliser pour un *milieu dissipatif* en écrivant $\varepsilon = \varepsilon_r - j\varepsilon_i$ on obtient alors

$$|E|^2 \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x} = \beta_0\, E_0^2 + \int k^2\, \varepsilon_i |E|^2\, \mathrm{d}x \qquad (19'')$$

Notons que

$$E^2\, \mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}x = -\, \omega\mu_0\, \mathcal{R}e(E \times H^*).$$

$\mathcal{R}e(E \times H^*)$ = puissance transmise par unité de surface à travers le plan d'abscisse x.

$\int_0^x k^2\, \varepsilon_i |E|^2\, \mathrm{d}x = \mu_0\, \omega\, \times$ puissance consommée dans un cylindre de longueur x et d'aire de section droite àgale à 1. Il en résulte que

$$E_0^2 = -\, \omega\mu_0 \times$$

[puissance transmise en x + puissance consommée de 0 à x].

La relation (19) *n'exprime donc rien d'autre que le principe de conservation de l'énergie.*

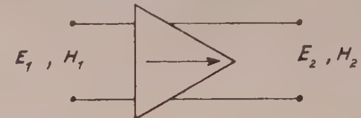
Remarques : 1. φ est la phase du champ électrique résultant et non celle d'une quelconque onde incidente ou réfléchie.

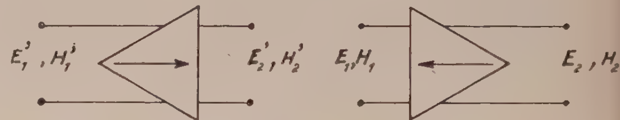
2. La relation ci-dessus démontrée serait évidemment valable pour H si ε était constante et μ variable en fonction de x.

3. La constante d'intégration β_0 est caractéristique non seulement des propriétés du milieu mais aussi des conditions aux limites.

ANNEXE 2

Matrices de transfert de tranches de plasma symétriques par rapport au plan central. — Considérons la tranche de plasma comme un quadripôle de matrice $\mathcal{U}$ (*fig.* 10). La matrice $\mathcal{U}'$, d'une tranche symétrique par rapport au plan central (*fig.* 10) est identique à celle de la tranche initiale





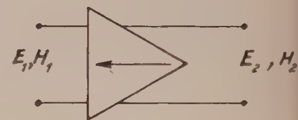


Fig. 10. — Quadripôles représentatifs de tranches de plasma symétriques par rapport au plan central.

lorsque le sens de propagation de l'énergie est inversée. Or pour inverser le sens de propagation, il suffit de changer partout H en $-H$ (*fig.* 10). Or

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ H_1 \end{pmatrix} = \mathcal{U} \begin{pmatrix} E_2 \\ H_2 \end{pmatrix}$$

et

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ H_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ -H_1 \end{pmatrix} ; \quad \begin{pmatrix} E_2 \\ H_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_2 \\ -H_2 \end{pmatrix}.$$

On en déduit

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ -H_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^{-1} \mathcal{U} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_2 \\ -H_2 \end{pmatrix} = \mathcal{U}_t \begin{pmatrix} E_2 \\ -H_2 \end{pmatrix}.$$

La matrice cherchée est donc

$$\mathcal{U}' = \mathcal{U}_t^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^{-1} \mathcal{U}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

qui est équivalente à celle définie par (32)

Manuscrit reçu le 20 mai 1961.

BIBLIOGRAPHIE

Budden, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1957, **53**, 3, 669-82 ; *Proc. Roy. Soc.*, 1959, **249** A, 1258, 387-401.

Deb, *Indian J. Phys.*, 1940, **14**, 451.

Epstein, *Proc. Nat. Acad. Soc. Amer.*, 1930, **16**, 627-637.

Golant, *Z. Tekh. Fiz.*, 1960, **30**, 11, 1265-1320.

Hartree, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1929, **25**, 47 ; *Proc. Roy. Soc.*, 1931, **131** A, 428-450.

Saha et Rai, *Proc. Nat. Inst. Sc. India*, 1937, **3**, 359.

Wilkes, *Proc. Roy. Soc.*, 1940, **175** A, 143-163.

CALCUL DES INTÉGRALES DE RECOUVREMENT DES FONCTIONS D'ONDE DE DEUX OSCILLATEURS HARMONIQUES DIFFÉRENTS APPLICATION AUX INTENSITÉS DANS LES SPECTRES DES MOLÉCULES DIATOMIQUES

I

Par JEAN RUAMPS,

Laboratoire de Physique Expérimentale de la Faculté des Sciences de Bordeaux (*).

Résumé. — Étude des éléments de matrice $< v_1|r^n|v_2 > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{v_1}(r).r^n.\Psi_{v_2}(r)\, dr$ quand $\Psi_{v_1}(r)$ et $\Psi_{v_2}(r)$ sont des fonctions d'onde de deux oscillateurs harmoniques décalés et de fréquences ω_1 et ω_2 différentes. Relations de récurrence. Cas où $n = 0$: expression simple du résultat quand $\omega_2 = \omega_1$, développement en série quand $\omega_2 \neq \omega_1$, application au calcul des intensités dans les spectres de molécules diatomiques (en particulier dans la séquence principale). Un deuxième article traitera les cas où $n \neq 0$.

Abstract. — Study of the matrix elements $< v_1|r^n|v_2 > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{v_1}(r).r^n.\Psi_{v_2}(r)\, dr$ when Ψ_{v_1} and $\Psi_{v_2}(r)$ are wave functions of two oscillators, out of phase, and of different frequencies ω_1 and ω_2. Recurrence relations. Case where $n = 0$. Simple expression of the result, when $\omega_2 = \omega_1$. Development in a series, when $\omega_1 \neq \omega_2$. Application to the calculus of the intensities, in diatomic molecular spectra (specially in the main sequence).

A second article will deal with the cases where $n \neq 0$.

I. Introduction. — Dans le spectre électronique d'une molécule diatomique l'intensité d'une bande v_1, v_2 est proportionnelle au carré de l'élément de matrice

$$< v_1|R_e|v_2 > = \int_0^{\infty} \Psi_{v_1}(r)\, R_e(r)\, \Psi_{v_2}(r)\, dr$$

où Ψ_{v_1} et Ψ_{v_2} sont les fonctions d'onde de vibration et $R_e(r)$ le moment de transition électronique calculé pour chaque distance internucléaire r en supposant les noyaux fixes. En première approximation on suppose $R_e(r)$ constant, ce qui permet de se limiter au calcul de

$$< v_1|v_2 > = \int_0^{\infty} \Psi_{v_1}(r)\, \Psi_{v_2}(r)\, dr.$$

On peut aussi essayer de développer $R_e(r)$ sous forme d'un polynôme en r pour mieux représenter les résultats expérimentaux [1]. Le calcul exige alors l'évaluation des éléments de matrice

$$< v_1|r^n|v_2 >.$$

Dans cet article nous nous limiterons au cas où Ψ_{v_1} et Ψ_{v_2} sont des fonctions d'onde d'oscillateur harmonique (¹). Diverses méthodes [3], [4] permettent d'ailleurs d'introduire des corrections d'anharmonicité dans ces calculs.

Le premier calcul des $< v_1|v_2 >$ a été fait par E. Hutchisson [5] en fonction de $r_1 - r_2$ et de $\alpha = \sqrt{\omega_2/\omega_1}$. Mais les expressions obtenues se compliquent vite quand $v_1 + v_2$ croît, surtout dans le voisinage de la séquence principale $v_1 = v_2$. Ces formules ont été tabulées depuis par Bates [4] dont les tables à double entrée (Δ_B et ω_2/ω_1) sont extrêmement commodes. Mais elles n'existent que pour $v_1 + v_2 \leqslant 4$ ainsi que pour 5-0, 6-0, 0-5, 0-6.

C. Manneback [6] étudiant le même problème a pu, grâce à l'adoption de deux variables plus symétriques par rapport aux deux états 1 et 2, reconnaître dans les $< v_1|v_2 >$ des polynômes d'Hermite à deux variables et utiliser les relations de récurrence qui les lient [7]. Ces relations de récurrence permettent de calculer de proche en proche le tableau des $< v_1|v_2 >$ relatif à une molécule déterminée. D'autre part C. Manneback et A. Rahman [8] ont indiqué une méthode d'obtention du tableau des $< v_1|r|v_2 >$ à partir du tableau des $< v_1|v_2 >$.

P. A. Fraser, W. R. Jarmain et R. W. Nicholls [1] ont proposé une méthode approchée d'évaluation des $< v_1|r^n|v_2 >$ à partir des $< v_1|v_2 >$.

Enfin l'auteur [9], [10], [11] a indiqué le principe d'une méthode de calcul des $< v_1|v_2 >$ à l'aide d'un développement en série. C'est cette méthode, particulièrement commode dans la séquence principale, que je vais exposer dans cet article. Des relations de récurrence généralisant

(*) Une grande partie des résultats présentés dans ce travail a été obtenue par l'auteur lorsqu'il se trouvait à l'Institut de Physique de la Faculté des Sciences de Lille.

(¹) Dans ce cas, le remplacement classique des intégrales de 0 à $+\infty$ par des intégrales de $-\infty$ à $+\infty$ se justifie par des considérations analogues à celles de Ter Haar [2] pour le potentiel de Morse.

celles de Manneback [6] ont également été obtenues au cours des calculs. Un autre article sera consacré au calcul des quantités $< v_1|r^n|v_2 >$.

II. **Notations.** — Les deux états électroniques envisagés seront notés 1 et 2. Comme les deux états jouent le même rôle nous pourrons, comme Bates [4], supposer que la numérotation est telle que $\omega_1 \leqslant \omega_2$, ω_1 et ω_2 étant les fréquences de vibration en kaysers des états 1 et 2. Nous appellerons r_1 et r_2 les distances internucléaires d'équilibre et nous introduirons l'abscisse $x = r - r_0$ comptée à partir du point 0 qui correspond à la distance internucléaire r_0. Nous poserons

$$\left.\begin{aligned} a &= \frac{\sqrt{\omega_2/\omega_1} - 1}{\sqrt{\omega_2/\omega_1} + 1} \\ \Delta &= (1 - a^2)(r_1 - r_2) \\ r_0 &= \frac{r_1 + r_2}{2} - a\frac{r_1 - r_2}{2} \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Enfin nous appellerons « unité ω » l'unité de longueur $\frac{1}{2\pi}\sqrt{h/\mu\omega c}$ [2] qui permet d'écrire les fonctions d'onde normées de l'oscillateur harmonique de fréquence ω sous la forme réduite :

$$\varphi_v(x) = \sqrt{\frac{1}{2^v . v! \sqrt{\pi}}}\, e^{-x^2/2} H_v(x) \ [3]. \quad (2)$$

L' « unité ω » que nous emploierons correspond à ω donné par :

$$\sqrt{\omega} = (\sqrt{\omega_1} + \sqrt{\omega_2})/2. \quad (3)$$

C'est avec cette unité de longueur que r_1, r_2, r_0 et Δ doivent être évalués. Δ_B utilisé par Bates [4] est lié à Δ par $\Delta = \Delta_B(1 - a)$.

Dans ces conditions, les fonctions d'onde $\Psi_{v_1}(x)$ et $\Psi_{v_2}(x)$ normées par rapport à la variable x s'écrivent :

$$\begin{cases} \Psi_{v_1}(x) = \sqrt{1-a}\, \varphi_{v_1}(X_1) \\ \Psi_{v_2}(x) = \sqrt{1+a}\, \varphi_{v}(X_2) \end{cases} \text{avec} \begin{cases} X_1 = x - (ax + \Delta/2) \\ X_2 = x + (ax + \Delta/2) \end{cases} \quad (4)$$

Les éléments de matrice qui nous intéressent deviennent alors :

$$< v_1|x^n|v_2 > = \sqrt{1-a^2}\int_{-\infty}^{+\infty} x^n \varphi_{v_1}(X_1)\, \varphi_{v_2}(X_2)\, dx. \quad (5)$$

Comme $\varphi_{v_1}(X_1)\, \varphi_{v_2}(X_2)$ ne dépend de a et de Δ que par l'intermédiaire de $\Delta + 2ax$, on peut écrire :

$$\varphi_{v_1}(X_1)\, \varphi_{v_2}(X_2) = F(x, \Delta + 2ax). \quad (6)$$

Il existe donc une relation entre les dérivées des éléments de matrice par rapport à a et par rapport à Δ. Nous introduirons la notation :

$$< v_1|x^n|v_2 >^{(p)} = 2^p \frac{d^p < v_1|x^n|v_2 >}{d\Delta^p} \quad (7)$$

et on vérifie facilement que :

$$\frac{< v_1|x^{n+p}|v_2 >^{(p)}}{\sqrt{1-a^2}} = \frac{d^p\left[\frac{< v_1|x^n|v_2 >}{\sqrt{1-a^2}}\right]}{da^p}. \quad (8)$$

Enfin nous appellerons $< v_1|x^n|v_2 >_0$ et $< v_1|x^n|v_2 >_0^{(p)}$ les fonctions de Δ que l'on obtient en posant $a = 0$ dans les quantités que nous venons de définir.

III. **Relations générales de récurrence.** — Calculons $< v_1|X_1 x^n|v_2 >$ d'une part en remplaçant X_1 par sa valeur (équation (4)), d'autre part en utilisant la relation (cf. par exemple [12]) :

$$X\, \varphi_v(X) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{v}\, \varphi_{v-1}(X) + \sqrt{v+1}\, \varphi_{v+1}(X)]. \quad (9)$$

Traitons de même $< v_1|X_2\, x^n|v_2 >$. Nous obtenons ainsi deux relations qui, par soustraction et addition membre à membre, se transforment en :

$$\begin{aligned} &< v_1|x^{n+1}|v_2 > \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}[\sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 > + \sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > \\ &+ \sqrt{v_1+1} < v_1 + 1|x^n|v_2 > + \sqrt{v_2+1} < v_1|x^n|v_2 + 1 >] \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} &2a < v_1|x^{n+1}|v_2 > + \Delta < v_1|x^n|v_2 > \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > - \sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 > \\ &+ \sqrt{v_2+1} < v_1|x^n|v_2 + 1 > - \sqrt{v_1+1} < v_1 + 1|x^n|v_2 >]. \end{aligned} \quad (11)$$

Une troisième relation s'obtient en remarquant que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx}[\Psi_{v_1}(x)\, \Psi_{v_2}(x)\, x^n]\, dx = 0.$$

Il suffit d'effectuer le calcul de la dérivée et d'utiliser la relation [12]

$$\varphi'_v(X) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{v}\, \varphi_{v-1}(X) - \sqrt{v+1}\, \varphi_{v+1}(X)] \quad (12)$$

pour arriver à :

$$\frac{1+a}{\sqrt{2}}[\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > - \sqrt{v_2+1} < v_1|x^n|v_2 + 1 >]$$

(2) Cette unité s'évalue en Å par $1/0{,}1722\sqrt{\mu_A\, \omega}$ si ω est en kaysers et si μ_A, masse réduite de la molécule, est évaluée en unité de masse atomique (échelle physique).

(3) Nous adoptons la définition habituelle des polynômes d'Hermite : $H_v(x) = (-1)^v e^{x^2} \frac{d^v}{dx^v}(e^{-x^2})$. Il importe de noter que Bates [4] supprime le facteur $(-1)^v$ ce qui change le signe de $< v_1|v_2 >$ quand v_1 et v_2 sont de parités différentes.

$$+\frac{1-a}{\sqrt{2}}[\sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 > - \sqrt{v_1+1} < v_1+1|x^n|v_2>] + n < v_1|x^{n-1}|v_2> = 0. \quad (13)$$

Enfin en calculant $\frac{d}{d\Delta} < v_1|x^n|v_2 >$ à l'aide de la relation (12) puis en dérivant p fois les deux membres par rapport à Δ, on arrive à :

$$< v_1|x^n|v_2 >^{(p+1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 >^{(p)} - \sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 >^{(p)} + \sqrt{v_1+1} < v_1 + 1|x^n|v_2 >^{(p)} - \sqrt{v_2+1} < v_1|x^n|v_2 + 1 >^{(p)}. \quad (14)$$

Parmi les innombrables combinaisons de ces quatre relations notons en particulier les suivantes : éliminons entre les relations (10), (11) et (13) :

1° $< v_1 + 1|x^n|v_2 >$ et $< v_1|x^n|v_2 + 1 >$:

$$(1+a^2) < v_1|x^{n+1}|v_2 > = \frac{1+a}{\sqrt{2}}\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > + \frac{1-a}{\sqrt{2}}\sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 > + \frac{n}{2} < v_1|x^{n-1}|v_2 > - \frac{a\Delta}{2} < v_1|x^n|v_2 >. \quad (15)$$

2° $< v_1|x^{n+1}|v_2 >$ et $< v_1|x^n|v_2 + 1 >$:

$$\sqrt{v_1+1} < v_1 + 1|x^n|v_2 > = \frac{1-a^2}{1+a^2}\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > - \frac{1+a}{1+a^2}\frac{\Delta}{\sqrt{2}} < v_1|x^n|v_2 > + \frac{n}{\sqrt{2}}\frac{1-a}{1+a^2} < v_1|x^{n-1}|v_2 > - \frac{2a}{1+a^2}\sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 >. \quad (16)$$

3° $< v_1|x^{n+1}|v_2 >$ et $< v_1 + 1|x^n|v_2 >$:

$$\sqrt{v_2+1} < v_1|x^n|v_2 + 1 > = \frac{1-a^2}{1+a^2}\sqrt{v_1} < v_1 - 1|x^n|v_2 > + \frac{1-a}{1+a^2}\frac{\Delta}{\sqrt{2}} < v_1|x^n|v_2 > + \frac{n}{\sqrt{2}}\frac{1+a}{1+a^2} < v_1|x^{n-1}|v_2 > + \frac{2a}{1+a^2}\sqrt{v_2} < v_1|x^n|v_2 - 1 > \quad (17)$$

Enfin en dérivant $p+1$ fois par rapport à Δ la relation (10) et en utilisant la relation (14) on arrive à :

$$< v_1|x^{n+1}|v_2 >^{(p+1)} = \frac{1}{4}[2\sqrt{v_2(v_1+1)} < v_1 + 1|x^n|v_2 - 1 >^{(p)} - 2\sqrt{v_1(v_2+1)} < v_1 - 1|x^n|v_2 + 1 >^{(p)} + \sqrt{v_2(v_2-1)} < v_1|x^n|v_2 - 2 >^{(p)} - \sqrt{v_1(v_1-1)} < v_1 - 2|x^n|v_2 >^{(p)} + \sqrt{(v_1+1)(v_1+2)} < v_1 + 2|x^n|v_2 >^{(p)} - \sqrt{(v_2+1)(v_2+2)} < v_1|x^n|v_2 + 2 >^{(p)}]. \quad (18)$$

En faisant $n = 0$ dans les relations (16) et (17) on retrouve les relations I et II de C. Manneback [6]. Dans les mêmes conditions la relation (15) donne la relation utilisée par C. Manneback et A. Rahman [8] ([4]). Les relations que nous venons d'obtenir (en particulier (15)) permettent donc d'étendre les méthodes proposées par Manneback au calcul des $< v_1|x^n|v_2 >$ pour n quelconque.

IV. **Éléments de matrice** $< v_1|v_2 >$. — 1° CALCUL DES ÉLÉMENTS DE MATRICE $< v_1|v_2 >_0$ (CAS PARTICULIER $\omega_1 = \omega_2$).

J'ai pu montrer [9] que, dans ce cas, l'élément de matrice prenait la forme simple suivante (si $v_2 \geqslant v_1$) :

$$< v_1|v_2 >_0 = \sqrt{v_1!/v_2!}\, e^{-\Delta^2/4} (\Delta/\sqrt{2})^{v_2 - v_1} L_{v_1}^{v_2 - v_1}(\Delta^2/2) \quad (19)$$

$L_{v_1}^{v_2-v_1}$ est un polynôme de Laguerre :

$$L_n^a(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-a} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^{n+a}).$$

Si $v_2 < v_1$ on utilise la relation :

$$< v_1|v_2 >_0 = (-1)^{v_2 - v_1} < v_2|v_1 >_0. \quad (20)$$

Je rappelle que les tables de $e^{-t/2} L_n^0(t)$ calculées par Tricomi [13] pour $n \leqslant 10$ fournissent directement $< n|n >_0$ en posant $t = \Delta^2/2$. Des tables des $< v_1|v_2 >_0$ pour les séquences voisines de la séquence principale ont été calculées [14].

2° CALCUL DES ÉLÉMENTS DE MATRICE $< v_1|v_2 >$ (CAS GÉNÉRAL $\omega_1 \neq \omega_2$).

Nous chercherons à profiter du résultat précédent et pour cela nous développerons

$$G(\Delta, a) = \frac{< v_1|v_2 >}{\sqrt{1-a^2}}$$

([4]) Rappelons la correction qu'il faut apporter à cette relation : Yn' et Zn'' doivent être remplacés respectivement par $Y\sqrt{n'/2}$ et par $Z\sqrt{n''/2}$.

en série par rapport à a. En utilisant la relation (8) on montre facilement que :

$$G(\Delta, a) = < v_1|v_2 >_0 + \frac{a}{1!}\binom{v_2}{v_1}_1 + \ldots + \frac{a^p}{p!}\binom{v_2}{v_1}_p + \ldots \quad (21)$$

en posant

$$\binom{v_2}{v_1}_p = < v_1|x^p|v_2 >_0^{(p)}. \quad (22)$$

La relation (18) (en posant $n = p$) sert alors de relation de récurrence pour calculer $\binom{v_2}{v_1}_{p+1}$ à partir du tableau des $\binom{v_2}{v_1}_p$. En particulier, après quelques transformations utilisant les propriétés des $< v_1|v_2 >_0$, les deux premiers coefficients peuvent être mis sous la forme suivante :

$$\binom{v_2}{v_1}_1 = \sqrt{v_2(v_1+1)} < v_1+1|v_2-1 >_0 - \sqrt{v_1(v_1+1)} < v_1-1|v_2+1 >_0 \ (^5) \quad (23)$$

$$\begin{aligned}\binom{v_2}{v_1}_2 = & -[(2v_1 v_2 + v_1 + v_2) < v_1|v_2 >_0 \\ & + \sqrt{(v_1+1)(v_2+1)} < v_1+1|v_2+1 >_0 \\ & - \sqrt{v_1 v_2} < v_1-1|v_2-1 >_0 \\ & - \sqrt{v_2(v_2-1)(v_1+1)(v_1+2)} < v_1+2|v_2-2 >_0 \\ & - \sqrt{v_1(v_1-1)(v_2+1)(v_2+2)} < v_1-2|v_2+2 >_0].\end{aligned} \quad (24)$$

La relation (18) permet aussi de trouver des bornes supérieures pour les divers coefficients du développement en série. Il suffit d'utiliser l'inégalité de Schwarz $|< v_1|v_2 >| \leqslant 1$ et l'inégalité $\sqrt{ab} \leqslant (a+b)/2$. On obtient pour $\binom{v_2}{v_1}_p$ une borne supérieure de la forme $f_p(K)$ (avec $K = v_1 + v_2 + 1$) satisfaisant à la formule de récurrence suivante

$$f_{p+1}(K) = \frac{1}{4}[2Kf_p(K) + (K-2) f_p(K-2) + (K+2) f_p(K+2)]. \quad (25)$$

On trouve ainsi :

$$f_1(K) = K$$
$$f_2(K) = K^2 + 2$$
$$f_3(K) = K^3 + 8K$$
$$f_4(K) = K^4 + 20K^2 + 24$$

etc...

(5) Dans la référence [10] ce coefficient était affecté d'un signe erroné.

La borne supérieure du terme en a^p s'obtient ensuite par $\frac{a^p}{p!} f_p(K)$ et le tableau 1 donne, quand $a = 0{,}1$ ($\omega_2/\omega_1 = 1{,}5$), les bornes supérieures des premiers termes de la série en fonction de $v_1 + v_2 = K - 1$. Ce tableau permet de trouver les bornes supérieures correspondant à n'importe quel a, par simple multiplication par $(a/0{,}1)^p$.

TABLEAU 1

BORNES SUPÉRIEURES DES TERMES EN a, a^2, a^3 ET a^4 POUR $a = 0{,}1$

$v_1 + v_2$	1er ORDRE	2e ORDRE	3e ORDRE	4e ORDRE
0	0,10	0,015	0,0015	0,0002
2	0,30	0,055	0,0085	0,0012
4	0,50	0,135	0,028	0,0048
6	0,70	0,26	0,067	0,0142
8	0,90	0,42	0,133	0,034
10	1,10	0,62	0,24	0,071
12	1,30	0,86	0,39	0,133
14	1,50	1,13	0,58	0,23
16	1,70	1,45	0,84	0,37
18	1,90	1,81	1,17	0,57
20	2,10	2,21	1,57	0,85

3° DISCUSSION. — On peut faire les remarques suivantes sur la série (21).

1° Cette série a pour rayon de convergence 1, ce qui entraîne sa validité quel que soit le rapport ω_2/ω_1. En effet, en remplaçant dans les formules d'Hutchisson [5] α et Δ_H par leurs valeurs en fonction de a et de Δ ($\alpha = \sqrt{(1+a)/(1-a)}$ et $\Delta_H = \Delta_B = \Delta/1-a$), on s'aperçoit que la fonction obtenue a pour seuls points singuliers relatifs à la variable a les pôles $+1$ et -1.

2° Si $v_1 = v_2 = v$, les termes de rang p impair sont identiquement nuls. En effet dans ce cas $F(x, \Delta)$ (cf. équation (6)) et ses dérivées par rapport à Δ sont des fonctions paires de x.

3° Lorsqu'on décide du nombre de termes à utiliser, il ne faut pas oublier que les bornes supérieures obtenues ci-dessus sont nettement pessimistes. Par exemple, dans le cas de $< 2|2 >$ (cf. [10]), le terme en a^2 n'atteint la moitié de sa borne supérieure que pour $\Delta = 0$ et il décroît vite dès que Δ s'accroît. Des bornes supérieures plus strictes seraient souhaitables, même si elles devaient faire intervenir Δ.

Ces remarques et l'examen du tableau 1 montrent que si $v_1 = v_2$ on a très facilement une bonne approximation. En ne prenant que $< v_1|v_2 >_0$, la borne supérieure de l'erreur (pratiquement égale à celle du terme en a^2) n'atteint 0,05 que pour $v_1 = v_2 = 3$ si $\omega_2/\omega_1 \leqslant 1{,}22$. Dans les mêmes conditions, on peut aller jusqu'à $v_2 = v_1 = 6$

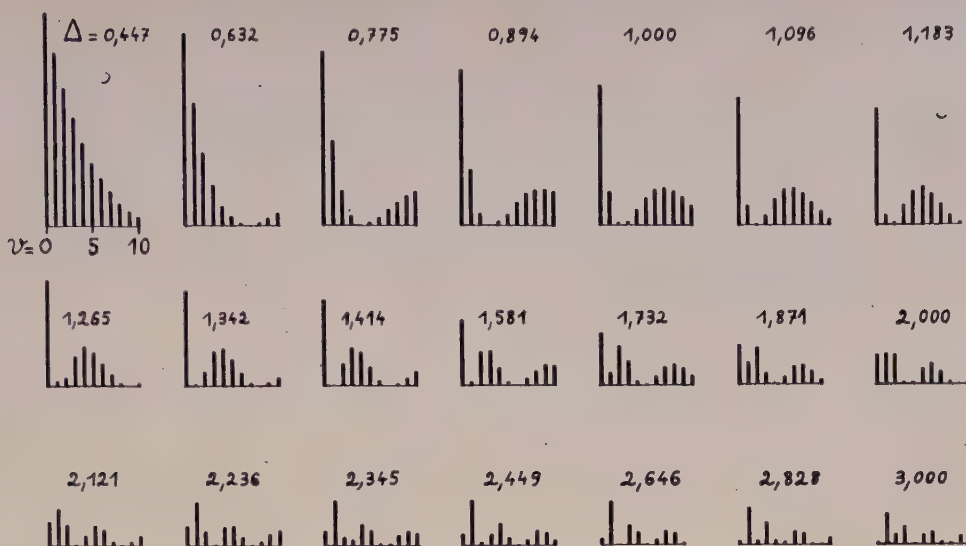


FIG. 1. Intensités dans la séquence principale en fonction de Δ (Sur chaque schéma les traits verticaux ont une longueur proportionnelle au carré des éléments de matrice $< v|v >_0$.)

si $\omega_2/\omega_1 \leqslant 1{,}10$. Si l'on souhaite plus de précision, il suffit dans la plupart des cas d'évaluer le terme en a^2 (c'est alors le terme en a^4 qui limite la précision). Par contre, si $v_1 \neq v_2$, il est presque toujours indispensable de calculer le terme en a. De plus, même si on calcule aussi le terme en a^2, c'est le terme en a^3 et non celui en a^4 qui limite la précision.

La méthode que nous venons de décrire est donc spécialement recommandable pour l'étude de la séquence principale d'un système de bandes. En effet nous venons de voir que, dans d'assez larges limites Δ est pratiquement le seul paramètre réglant la répartition d'intensité, a n'intervenant que très peu. La répartition d'intensité dans la séquence principale peut donc, tant que a n'est pas trop grand, être représentée par une unique série de schémas correspondant chacun à une valeur de Δ (figure 1 établie à l'aide des tables de Tricomi). Cette figure permet par simple comparaison avec un spectre d'évaluer approximativement le Δ correspondant (en tenant compte évidemment du facteur de Boltzman relatif à chaque niveau de vibration de l'état supérieur).

D'autre part cette méthode de calcul doit permettre la construction de tables des $< v_1|v_2 >$ en fonction de Δ et de a d'une manière plus commode qu'avec les formules d'Hutchisson. En effet la complication de ces dernières les rend vite inutilisables quand $v_1 + v_2$ augmente, surtout dans la séquence principale. Ces tables seraient d'ailleurs plus pratiques que celles de Bates, car le choix de notre Δ réduirait beaucoup les variations des $< v_1|v_2 >$ en fonction de a, ce qui faciliterait les interpolations.

Mentionnons enfin que ces calculs ont trouvé d'autres applications [15]. Ils fournissent en effet les $< v_1|v_2 >$ sous une forme relativement maniable.

Manuscrit reçu le 9 mai 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] FRASER (P. A.), *Canad. J. Phys.*, 1954, **32**, 515. NICHOLLS (R. W.) et JARMAIN (W. R.), *Proc. Phys. Soc.*, Sect. A, G.-B, 1956, **69**, 253. NICHOLLS (R. W.), *Proc. Phys. Soc.*, Sect. A, G.-B, 1956, **69**, 741.
[2] TER HAAR (D.), *Phys. Rev.*, 1946, **70**, 222.
[3] HUTCHISSON (E.), *Phys. Rev.*, 1931, **37**, 45. PILLOW (M. E.), *Proc. Phys. Soc.*, Sect. A, G.-B, 1951, **64**, 772. RUAMPS (J.), *Thèse*, Lille, 1957 ; *Ann. Physique*, 1959, **4**, 1111-1156. GRANDMONTAGNE (R.), *C. R. Acad. Sc.*, 1957, **244**, 2586. GRANDMONTAGNE (R.), *J. Physique Rad.*, 1958, **19**, 151.
[4] BATES (D. R.), *Month. Not. R. Astr. Soc.*, G.-B, 1952, **112**, 614.
[5] HUTCHISSON (E.), *Phys. Rev.*, 1930, **36**, 410.
[6] MANNEBACK (C.), *Physica*, 1951, **17**, 1001.
[7] APPEL (P.) et KAMPE DE FERIET (J.), Fonctions hypergéométriques à plusieurs variables, fonctions hypersphériques et polynômes d'Hermite (Gauthier-Villars, 1925).
[8] MANNEBACK (C.) et RAHMAN (A.), *Physica*, 1954, **20**, 497.
[9] RUAMPS (J.), *C. R. Acad. Sc.*, 1956, **243**, 2034.
[10] RUAMPS (J.), *C. R. Acad. Sc.*, 1957, **244**, 184.
[11] RUAMPS (J.), Réunion internationale de Spectroscopie Moléculaire, Fribourg, 1957.
[12] PLUVINAGE (P.), Éléments de Mécanique Quantique (Masson, 1955).
[13] TRICOMI (F.), *Atti Acad. Sc. Torino, Cl. Sc. Fis. Mat. Nat.*, 1941, **76**, 288.
[14] NICOLAS (N.), Diplôme d'Études Supérieures, Bordeaux, 1960.
[15] CURIE (D.), *C. R. Acad. Sc.*, 1958, **246**, 404. RUAMPS (J.), *J. Physique Rad.*, 1960, **21**, 52 S.

EXPOSÉ ET MISE AU POINT BIBLIOGRAPHIQUE

PROPAGATION DES CHOCS INTERATOMIQUES DANS LES SOLIDES

Par J. ROUSSEL,
Faculté des Sciences d'Orsay (*).

Résumé. — Le ralentissement dans un solide d'un atome primaire animé d'une grande vitesse, se fait par une succession de collisions pouvant déplacer des atomes « secondaires ». On a pu montrer que, dans certaines conditions, il pouvait y avoir « canalisation » des chocs de long d'une rangée d'atomes ne donnant naissance à aucun nouvel atome « déplacé ». Ce phénomène a été étudié théoriquement et mis en évidence expérimentalement.

Abstract. — In a solid, the slowing down of a high speed primary atom involves a succession of collisions which may displace secondary atoms. It has been shown that, under special conditions, a focusing process can take place along a row of atoms, without producing of a new displaced atom. This phenomenon has been theoritically investigated and experimentally demonstrated.

Introduction. — L'effet des radiations sur les solides est un problème extrêmement complexe. Le comportement des solides dépend de leur nature (cristaux ioniques, métalliques, moléculaires ou cristaux de valence) et aussi de la nature de la radiation utilisée. Un des effets des radiations est de déplacer un certain nombre d'atomes (atomes primaires) qui sont lancés à travers le cristal avec une certaine énergie cinétique. Par une succession de collisions, ils vont à leur tour expulser d'autres atomes appelés « secondaires » hors de leur position d'équilibre et la structure du cristal va se trouver finalement perturbée par un ensemble de lacunes et d'interstitiels.

Le nombre de défauts ainsi produits dans les solides a été évalué, ces dernières années, à l'aide de diverses approximations [1]. La première étape du calcul est l'estimation du nombre d'atomes primaires n_p produits par unité de volume au cours d'une irradiation. On a :

$$n_p = \Phi t n_0 \sigma_d$$

où Φ = nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité de temps ;
t = durée de l'irradiation ;
n_0 = nombre d'atomes par unité de volume ;
σ_d = section efficace, par atome, pour les collisions introduisant des déplacements permanents ; elle dépend du type d'interaction utilisée.

Dans une seconde étape on évalue le nombre d'atomes déplacés par un atome primaire. Un premier type d'approximation [2, 3, 4] consiste à analyser le phénomène comme une cascade de collisions à deux corps, entre atomes en mouvement et atomes au repos. Leur liaison avec la maille est simplement schématisée par l'existence d'un seuil énergétique E_d ($\simeq$ 25 eV) : pour mettre l'atome en mouvement il suffit de lui communiquer une énergie supérieure à E_d ; on considère qu'il peut ensuite se mouvoir librement jusqu'au prochain choc. Suivant ce modèle on peut s'attendre à ce que le dommage résultant soit un ensemble de lacunes et d'interstitiels en nombre égal (paires de Frenkel) répartis au hasard, dans un domaine relativement petit. Les mesures de résistivité à basse température conduisent cependant à admettre que le nombre d'atomes « déplacés » (c'est-à-dire le nombre de paires lacune-interstitiel) est inférieur à ce que prévoit la théorie ($\simeq$ facteur 5). L'étude du désordre provoqué dans certains alliages par irradiation fournit une justification supplémentaire à l'introduction des collisions de remplacement dans lesquelles un plus grand nombre d'atomes en mouvement vient remplacer les atomes de la maille sans produire de défauts permanents supplémentaires.

Un deuxième type de modèles fait intervenir des collisions à plusieurs corps. Le petit domaine entourant l'atome frappé se comporte comme s'il était brusquement chauffé et son refroidissement obéit aux lois de la conduction thermique dans un milieu continu lorsque l'excitation est suffisamment faible pour ne déplacer que quelques atomes ; c'est la théorie des « points chauds » (thermal spikes). Au contraire, Brinkman [6] estime que le ralentissement des atomes primaires de grande énergie ($\simeq$ 10 keV) est très rapide et provoque dans un petit domaine une très grande densité de déplacements ; c'est la théorie des « pointes de déplacements » (displacement spikes).

Ces différents modèles sont difficiles à harmoniser entre eux et, de plus, on peut leur reprocher de ne pas tenir compte de la présence d'une structure périodique qui pourrait introduire des corrélations entre les collisions successives. Or en 1956 Wehner [7], en bombardant des monocristaux avec des ions Hg^+ d'énergie

(*) Travail effectué pendant un stage au C. E. N. de Saclay.

variant de 50 à 150 eV a observé une éjection préférentielle des atomes selon les rangées de plus forte densité, c'est-à-dire (110) pour les réseaux cubiques à faces centrées (Ag, Cu) et (111) pour les réseaux cubiques centrés (W, Mo, α-Fe). Il suggère alors que la cascade de chocs qui prend naissance au point d'impact se propage préférentiellement selon les rangées les plus compactes. Silsbee [8] a donné le nom de « focusing collisions » à de tels phénomènes en leur donnant une justification théorique. Depuis, un ensemble d'expériences et d'hypothèses sur ce processus semble amorcer une théorie plus cohérente des chocs dans les solides.

Canalisation des chocs le long d'une rangée d'atomes. — Les premiers travaux sur la « propagation directive » des chocs interatomiques dans les solides sont dus à Silsbee. Il considère une rangée de sphères dures, de diamètre R, la distance entre les centres, à l'équilibre, étant d (distance interatomique). Si la première sphère est lancée avec une énergie E_0 dans une direction faisant un angle θ_0 avec la rangée, on va assister à une succession de collisions à deux corps, se propageant le

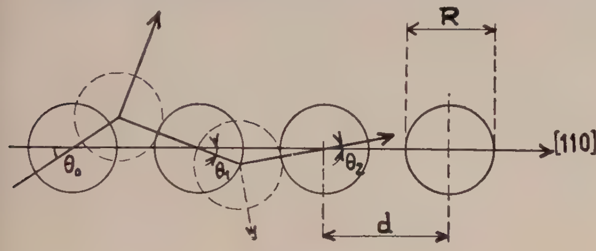


Fig. 1.

long de la rangée (*fig.* 1). Si θ_{n+1} et E_{n+1} sont les paramètres liés à la $(n+1)$ème sphère, on a les relations :

$$\frac{\sin\theta_{n+1}}{\sin\theta_n} = \alpha\cos\theta_n - (1-\alpha^2\sin^2\theta_n)^{1/2} \quad \text{où} \quad \alpha = d/R \quad (1)$$
$$(E_{n+1})/E_n = \cos^2(\theta_n+\theta_{n+1}).$$

— Le modèle choisi utilise deux principales approximations :

a) *Les collisions à deux corps* : Dans les solides où les distances interatomiques correspondent à un équilibre entre des forces de cohésion variant lentement avec la distance r entre les atomes et des forces de répulsion (dues au recouvrement des couches électroniques internes) variant très rapidement avec r, on peut estimer que cette hypothèse est correcte. C'est le cas, par exemple, des métaux et des cristaux ioniques.

b) *Les sphères dures* : Avec la forme de potentiel utilisée ($V(r) = A\,e^{-\beta r}$) on démontre que l'approximation des sphères dures est valable lorsque le transfert d'énergie pendant le choc se fait avec une grande efficacité (en réalité il faut que $T/E_0 \gg 2/\beta R$ où T est l'énergie transmise et E_0 l'énergie incidente). Le diamètre de la sphère dure est alors donné par $V(R) = 0{,}5\,T$. Par contre si T/E_0 est grand, on ne peut plus supposer que l'atome frappé reste immobile pendant la durée du choc. On peut estimer grossièrement que $\Delta T/T \sim (T/E_0\,\beta b)^{1/2}$ où b est le paramètre d'impact.

Ces deux approximations se contrebalancent donc mais non dans le cas d'une propagation linéaire des chocs où l'efficacité du transfert d'énergie est grande mais où $b \to 0$.

Reprenons maintenant les équations (1). On voit que si $\alpha < 2\cos\theta_n$, $\theta_{n+1} < \theta_n$ et l'angle θ va décroître au cours des collisions successives donnant ainsi naissance au phénomène de « canalisation des chocs ». Au bout d'un certain nombre de collisions, nous aurons le transfert d'une énergie constante.

La condition $d/R < 2\cos\theta_0$ montre que l'effet aura le plus de chance de se produire sur les rangées denses. Dans un cristal cubique à faces centrées, le plus grand angle θ de la vitesse initiale avec une rangée (110) est de 24° environ. Donc si $\alpha \leqslant 1{,}6$ une fraction appréciable de l'énergie initiale sera canalisée le long de la rangée (110).

Utilisant un potentiel de la forme

$$V(r) = 0{,}038 \exp[-17{,}2\,(r-d)/d]$$

et $V(R) = \frac{1}{2}E_n$, Silsbee [9] a trouvé que dans le cas du cuivre, $\alpha = 2$ si $E_n = 200$ eV, alors que $\alpha = 1{,}6$ correspond à $E_n = 50$ eV (R croît lorsque E_n décroît).

La propagation de ces chocs pourra être ralentie par l'agitation thermique qui perturbe la rangée et par un désordre de masse. Ces effets sont faibles ($\simeq 10^{-4}$ pour

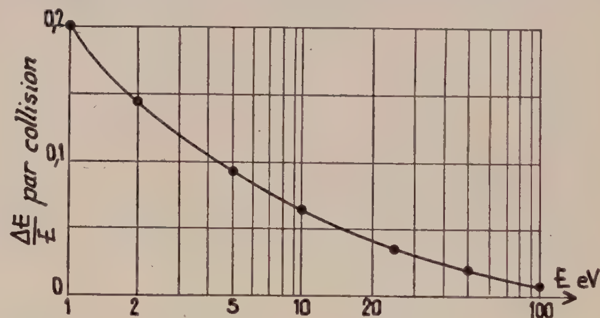


Fig. 2. — Énergie perdue par collision d'après Silsbee [8]

le désordre de masse dû au mélange isotopique du cuivre, mais cet effet peut être important pour les alliages). L'énergie sera surtout perdue par interaction avec les rangées voisines (voir *fig.* 2 pour le cuivre) et ceci limite la propagation du phénomène à une centaine de distances interatomiques.

Conclusions de Silbsee. — 1. On a vu que, pour le cuivre, lorsque l'énergie a une valeur inférieure à 50 eV, l'effet de « canalisation » devient important ; or un tel processus ne donne naissance à aucun « déplacement » (c'est-à-dire interstitiel) supplémentaire. On peut alors estimer que la valeur de 50 eV représente une assez bonne évaluation de E_d, minimum d'énergie nécessaire à « déplacer » un atome de cuivre. Cette valeur n'est pas en excellent accord avec les résultats expérimentaux [10] ($\simeq$ 22 eV). Cependant cet argument est très qualitatif, car un meilleur accord serait obtenu en modifiant légèrement le type d'interaction ; d'autre part, ceci suppose qu'il n'y a pas transport de matière, en même temps que d'énergie, au cours de la succession des collisions.

2. Un atome pourra être éjecté en position interstitielle si la chaîne est interrompue, comme à la rencontre d'une dislocation. Éventuellement le dernier atome de la chaîne pourra être éjecté de la surface du cristal si son énergie est suffisante, ce qui explique les expériences de Wehner.

3. Une vibration anormale d'un atome pourra être transportée le long des rangées denses en un temps relativement court et à une distance assez grande, ce qui bouscule la théorie des « thermal spikes ».

Extension du problème. — Selon les anciennes théories, l'étendue du domaine perturbé par un atome primaire est de l'ordre de son libre parcours moyen. Des expériences d'élasticité [11] à basses températures semblent indiquer un ordre de grandeur plus élevé ($\simeq$ 100 distances interatomiques). Leibfried [12] reprend alors les idées de Silsbee pour rendre compte de ce fait.

Au moment de la collision l'atome projectile se trouve en P (*fig.* 3). Comme la quantité de mouvement

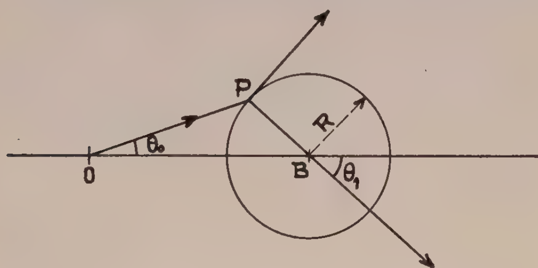


Fig. 3.

est transférée selon le vecteur joignant les centres des deux sphères dures, le deuxième atome sera projeté suivant PB, tandis que le premier partira dans une direction perpendiculaire (masses égales). Deux types de collisions peuvent alors se produire :

a) Les collisions « canalisées » ne peuvent se produire que si $\alpha \leqslant 2$, c'est-à-dire si $R > d/2$, ce qui correspond à une énergie limite E_F au-dessus de laquelle ce processus disparaît. On voit (*fig.* 4) l'angle limite θ_F pour

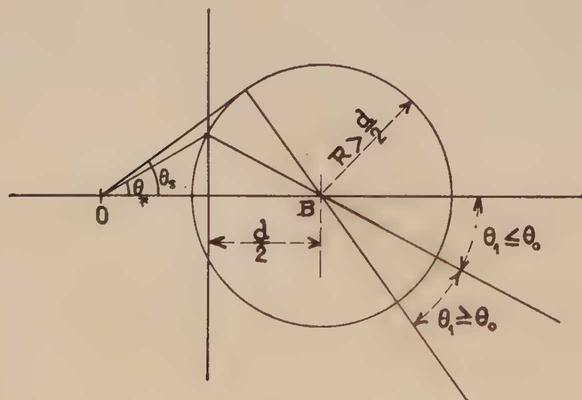


Fig. 4.

ce type de collisions et l'angle θ_S au-dessus duquel il n'y a plus du tout de collisions. Comme l'atome projectile est laissé dans une position plus proche de son propre site que du site suivant, tous les atomes peuvent revenir à leur position initiale. Il se produit essentiellement un transport d'énergie (*fig.* 5).

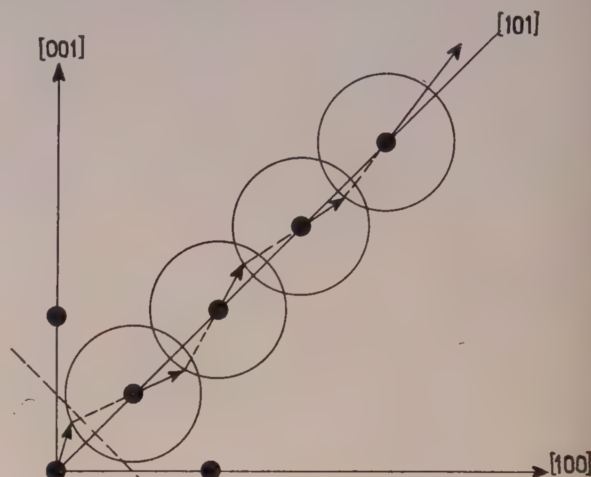


Fig. 5. — Canalisation des chocs.

b) Si $\alpha > 2$, les angles θ_n vont aller en croissant, c'est-à-dire que les atomes vont s'écarter de plus en plus de la rangée ; c'est ce que nous appellerons le phénomène de « dispersion des chocs ». D'autre part, l'atome projectile est plus proche du site suivant, après le choc ; il est donc probable, dans une telle suite de collisions, qu'une lacune se produise au début de la chaîne et qu'un interstitiel soit transporté le long de la rangée à une distance d'autant plus grande que l'angle initial sera petit. Leibfried appelle ce processus des « crowdion collisions » par analogie avec la vieille idée qui envisageait la possibilité d'interstitiel (statique) dans une rangée compacte, provoquant ainsi un « tas-

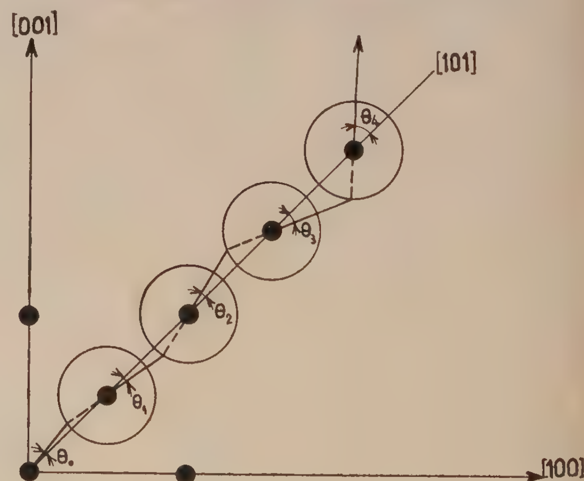


Fig. 6. — Dispersion des chocs.

sement » des atomes voisins ; ici il s'agit évidemment d'un « crowdion dynamique » (*fig.* 6).

Pour avoir des effets à longue distance, il faut que les quantités de mouvement fassent de petits angles avec la direction de la rangée. Leibfried poursuit alors

ses calculs en posant $\alpha = 2 + \eta$ avec $|\eta| \ll 1$ ce qui signifie que l'énergie du premier atome de la chaîne doit être de l'ordre de E_F.

En développant les formules (1) pour de petits angles, on trouve que l'énergie du n-ième atome est :

$$E_n = E_0 \left[\frac{\eta + \theta_0^2 - \theta_0^2\, e^{2n\eta}}{\eta}\right]^2.$$

On peut ainsi déterminer le nombre maximum $n^*(\eta)$ de collisions dans un « crowdion » (en posant $E_n = 0$ et $\eta > 0$) et l'énergie maximum que peut transporter un « focuson » ($n \to \infty$ et $\eta \leqslant 0$). En fait le nombre de collisions est limité par l'énergie perdue dans chaque choc, principalement à cause de l'action des atomes voisins. Pour un potentiel du type de Huntington (avec des constantes choisies pour que $E_d \simeq 22$ eV) et pour $\eta = 0$, Leibfried a trouvé que $n^*(0) \simeq 100$.

En se plaçant maintenant dans un cristal cubique à faces centrées, on peut évaluer, par des considérations sur les angles solides, la probabilité pour qu'un atome d'énergie $E_0 \simeq E_F$ donne naissance à un phénomène de « canalisation des chocs » ou de « dispersion des chocs ». Le calcul du nombre de collisions par atome primaire d'énergie E nécessite la connaissance du nombre de collisions $S(E, E_0)\,dE_0$ dans lesquelles une énergie comprise dans l'intervalle $(E_0, E_0 + dE_0)$ est transférée à un atome secondaire. Utilisant un modèle dû à Kinchin et Pease, Leibfried trouve que le nombre de « crowdions » se propageant plus loin que $n^*(\eta)$ est donné par :

$$\nu_c = \nu \frac{10}{n^{*2}}$$

où ν est le nombre d'interstitiels prévu par l'ancienne théorie. On voit que le nombre d'interstitiels pouvant être créé à grande distance est faible par rapport au nombre total d'interstitiels.

Le nombre de « focusons » est au contraire beaucoup plus grand (20 % de ν pour $n^* \simeq 50$). Notons que, selon Leibfried, les collisions « canalisées » ne transportent que de l'énergie ; il n'y aura production d'interstitiels que lorsque la chaîne sera interrompue, par exemple près d'une dislocation, ce qui provoque son bloquage et fournit une explication des expériences d'élasticité précédemment citées. Selon ce modèle, Gonser [13] explique la dilatation de l'uranium-α sous irradiation.

Résultats expérimentaux. — Thompson et Nelson [14, 15] ont bombardé des feuilles minces d'or, présentant de fortes orientations préférentielles, avec des protons d'énergie 0,3 MeV en opérant par transmission. Ils ont observé une éjection préférentielle d'ions selon les directions (110), la masse déposée sur le collecteur étant indépendante de l'angle d'incidence. Connaissant le nombre d'atomes éjectés par proton, et utilisant les méthodes de calcul de Leibfried ils trouvent que si $E_F^{110} \simeq 800$ eV, le parcours moyen d'un « focuson » est de l'ordre de 350 Å

($d = 2{,}88$ Å), $\beta d \simeq 15$ et $A = 0{,}8 \times 10^6$ eV

$$(V(r) = A\, e^{-\beta r})$$

et que l'énergie perdue par choc est de l'ordre de 7 eV. Le potentiel de répulsion pour l'or est alors

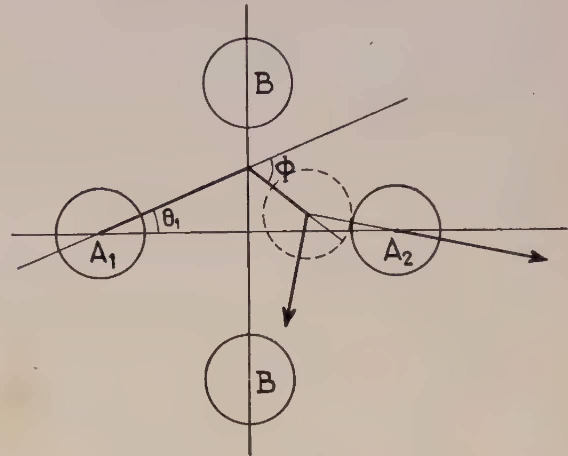
$$V(r) = 8 \times 10^5 \exp - 15\, r/d$$

ce qui conduit, en négligeant l'effet des électrons libres à une valeur de la compressibilité $0{,}33 \times 10^{-12}$ cm² dyne^{-1} en accord raisonnable avec la valeur expérimentale : $0{,}54 \times 10^{-12}$ cm² dyne^{-1}.

Par bombardement d'ions (A^+, Xe^+ énergie 10 keV), sur des couches d'or, de cuivre, et d'argent, ils ont observé un dépôt d'atomes neutres éjectés de la surface cristalline du même côté que le faisceau incident, selon trois directions préférentielles (110), (100) et (111).

Pour la direction (110), ils interprètent le phénomène par une « canalisation » de l'énergie suivant la rangée. Suivant l'argument qualitatif de Leibfried, ce phénomène a lieu sans transfert de matière.

Pour la rangée (100) il est clair (*fig.* 7) que les premiers voisins (atomes B) ont une influence prépondérante devant celle de l'atome suivant de la rangée. L'approximation des sphères dures n'est plus valable (paramètre d'impact non négligeable) pour ces collisions à incidence rasante. On peut définir une énergie de focalisation E_F au-dessus de laquelle la déflexion ne permet pas à l'atome A_1 de rencontrer l'atome A_2 et une énergie minimum E_1 au-dessous de laquelle l'atome A_1 ne peut traverser l'anneau des atomes B. Le même phénomène a lieu pour la rangée (111). La



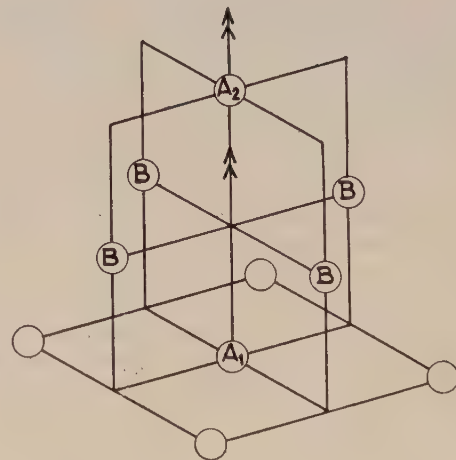


Fig. 7.

canalisation des chocs a lieu ici avec transport de matière.

Directions	E_F (eV) Cu	Au	E_1 (eV) Cu	Au
(110)	60	800	1	1
(100)	65	700	10	90
(111)	490	7 300	44	500

Valeurs calculées avec

$V(r) = 2 \times 10^4 \times \exp(-13\, r/d)$ pour Cu [12]

et $V(r) = 8 \times 10^5 \times \exp(-15\, r/d)$ pour Au.

Ces résultats sont à comparer à ceux de Koedam [16]. En bombardant avec des ions (A^+, Kr^+, Ne^+, 50 à 2 000 eV) sous incidence normale aux plans (100) des cristaux de cuivre, il a observé 4 directions (110) d'éjection préférentielle ainsi que la direction (100) normale à la surface bombardée ; l'intensité relative de ce dernier dépôt croît avec l'énergie des ions incidents, ce qui semble bien indiquer la présence d'un seuil minimum E_1^{100}.

Calculs numériques de Gibson, Goland, Milgram et Vineyard [17]. — Considérant que les méthodes de calcul analytique ne sont pas adaptées au problème si on veut tenir compte des interactions entre des atomes répartis régulièrement dans un espace à trois dimensions, cette équipe a lancé dès 1957 une série de calculs numériques, grâce à l'utilisation d'une machine IBM 704.

Les calculs ont été faits en prenant pour modèle de petits cristallites de cuivre (de 500 à 1 000 atomes) supposés isolés à l'intérieur d'un grand cristal, à la température de 0 °K pour ne pas avoir à tenir compte de l'agitation thermique. Les forces utilisées sont de trois types :

a) L'interaction entre les noyaux a la forme classique de Born-Mayer :

$$V(r) = A \exp\left[-\rho \frac{r-d}{d}\right] ;$$

la plupart des calculs a été faits avec :

$$A = 0{,}051, \qquad \rho = 13.$$

Des essais effectués avec d'autres couples de valeurs n'ont amené aucune différence appréciable dans les résultats statiques et dynamiques des calculs. La seule différence se trouve dans l'estimation de E_d. Le potentiel choisi conduit à $E_d \simeq 25$ eV dans la direction (110) de 25 à 30 eV dans la direction (100) et $\simeq 85$ eV dans la direction (111).

b) Les forces de cohésion (dues aux électrons de conduction) sont représentées par une force constante appliquée aux atomes de la surface et dirigée vers l'intérieur du cristal.

c) L'action des atomes de la matrice cristalline sur le cristallite considéré est représentée par une force élastique proportionnelle aux déplacements des atomes et une force dissipative proportionnelle à la vitesse des atomes de surface. En faisant varier la position de l'atome mis en mouvement et la taille du cristallite, on n'a pas observé de différences notables dans les dommages résultants, ce qui justifie le choix de ces forces.

Un atome quelconque de la maille est mis en mouvement avec des énergies E_0 variant de 20 à 400 eV, dans des directions faisant de petits angles avec les rangées compactes et une succession de « passages » dans la machine permet de déterminer la position de tous les atomes en fonction du temps.

— Le phénomène de « canalisation des chocs » a lieu pour des énergies $E_0 < 30$ eV dans la direction (110) et < 40 eV dans la direction (100). Contrairement aux hypothèse de Leibfried on peut avoir, dans ce modèle, un transport d'interstitiel aussi bien que l'énergie si l'énergie initiale E_0 est supérieure à E_d. Pour des énergies supérieures aux valeurs limites E_F, on voit apparaître le phénomène de « dispersion des chocs ». Les défauts créés sont des paires de Frenkel avec des lacunes situées près du point de départ des chaînes de collisions et des interstitiels dédoublés (split configuration), seuls stables.

— Concentrons-nous plus spécialement sur la rangée (110). On peut définir un paramètre de canalisation :

$$\Lambda(E_i) = (\theta_{i+1})/\theta_i.$$

La série de calculs faits montre que Λ dépend très peu de θ et l'on peut tracer une courbe moyenne $\Lambda(E_i)$ (*fig.* 8) ; d'autre part on peut écrire que l'énergie perdue

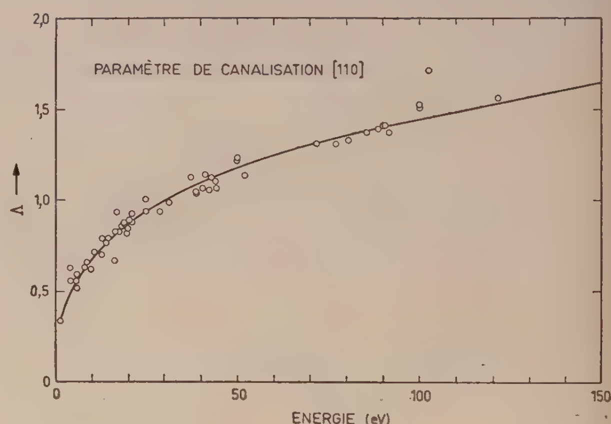


Fig. 8.

par choc dans la rangée (110) obéit approximativement à la relation :

$$\Delta E_i = [(2/3) + E_0 \sin^2 (\theta_i + \theta_{i+1})] \text{ eV} \qquad (2)$$

formule valable pour de faibles angles et pour les domaines d'énergie considérés.

Si la chaîne se disperse, θ croît et l'énergie transportée décroît plus rapidement jusqu'à ce qu'elle retombe au voisinage de E_F. La dispersion des chocs entraîne évidemment la mise en mouvement des rangées voisines.

Si $E_0 > E_d$, nous aurons un transport d'interstitiel. Les calculs montrent qu'un interstitiel est créé dès que l'énergie transportée tombe à 3,5 eV. La connaissance de Λ et la relation (2) permettent alors de prévoir le nombre de remplacements produits dans la rangée et par conséquent le nombre de distances interatomiques que peut parcourir un « focuson » (*fig.* 9).

La figure 10 illustre une énergie de calculs numériques. On communique au temps $t = 0$, une énergie

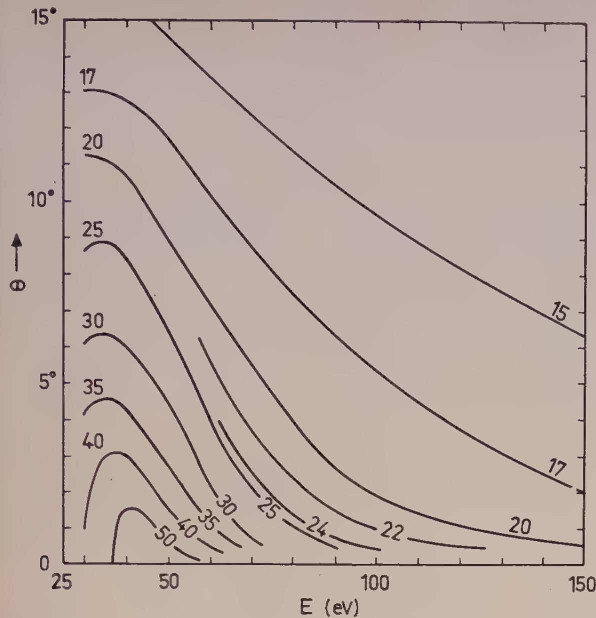


FIG. 9. — Les abaques représentées ici permettent de déterminer en fonction de θ_0 et de E_0 le nombre de distances interatomiques parcourues par un interstitiel « canalisé » le long de la rangée (110) [17].

Les courbes s'arrêtent pour $E \simeq 30$ eV. Pour des énergies inférieures nous n'avons plus en effet que de « l'énergie canalisée » et le calcul ne s'applique pas à ce cas.

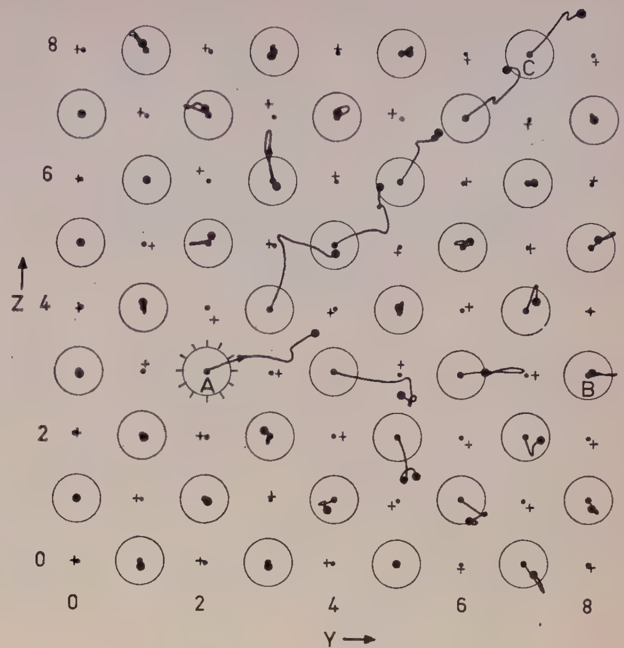


FIG. 10. — La figure représente un plan (100). Les positions d'équilibre des atomes du plan sont entourées d'un cercle. Les gros points noirs indiquent la position des atomes au temps $t = 324.10^{-15}$ secondes. Les petits points représentent les positions d'équilibre des atomes des plans adjacents, les croix leur position finale. L'atome A a une énergie initiale de 40 eV [17].

de 40 eV à l'atome A ; sa vitesse initiale fait un angle de 22° 1/2 avec l'axe y (100) tout en restant dans le plan représenté. On voit nettement un phénomène de canalisation des chocs avec transport d'interstitiel le long de la rangée AC (100). Dans la direction AB, au contraire, il y a seulement canalisation de l'énergie sauf peut-être l'atome suivant A qui semble vouloir produire un interstitiel dédoublé.

On peut hésiter dans le choix des hypothèses de départ mais le calcul numérique offre de grandes possibilités. Un des aspects attachants du travail de Vineyard et son équipe est de permettre de suivre l'évolution du phénomène au cours du temps ; un film illustre d'ailleurs leurs résultats et donne une vision d'ensemble des mouvements simultanés des atomes de la maille.

Conclusion. — Les travaux récents sur la propagation des chocs dans les solides permettent une meilleure compréhension des dommages produits par irradiation. Par exemple, ils montrent la possibilité d'une large séparation lacune-interstitiel et ils apportent des lumières sur le mécanisme du désordre dans les alliages. Malgré certaines divergences, les modèles proposés conduisent à une même description qualitative du phénomène. De plus ils ont tenu compte de l'influence du réseau sur le comportement des atomes et l'on peut espérer que la prise en considération de ce fait fondamental amorce une théorie plus cohérente des défauts créés par irradiation dans les solides.

Manuscrit reçu le 13 décembre 1960.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Les différentes théories peuvent être trouvées dans : DIENES (G. J.) et VINEYARD (G. H.), Radiation Effects in Solids (Interscience Publishers Inc., N. Y., 1957). SEITZ (F.) et KOEHLER (J. S.), Solid State Physics, vol. **2**, p. 305 (Ed. F. Seitz and D Turnbull, Ac. Press Inc., N. Y., 1956)

[2] KINCHIN (G H) et PEASE (R S.), *Rep. Progr. Physics*, 1955, **18**, 1.

[3] HARRISON (W. A.) et SEITZ (F.), *Phys. Rev.*, 1955, **98**, 1530.

[4] SNYDER (W. S.) et NEUFELD (J.), *Phys. Rev.*, 1955, **97**, 1636 ; 1955, **99**, 1326 ; 1956, **103**, 862.

[5] KINCHIN (G. H.) et PEASE (R. S.), *J. Nucl. Energy*, 1955, **1**, 200.

[6] BRINKMAN (J. A.), *J. Appl. Physics*, 1954, **25**, 961 ; *Amer. J. Phys.*, 1956, **24**, 246.

[7] WEHNER (G. K.), *Phys. Rev.*, 1956, **102**, 690.

[8] SILSBEE (R. H.), *J. Appl. Physics*, 1957, **28**, 1246.

[9] HUNTINGTON (H. B.), *Phys. Rev.*, 1953, **91**, 1092.

[10] CORBETT (J. W.), DENNEY (J. M.), FISKE (M. D.) et WALKER (R. M.), *Phys. Rev.*, 1957, **108**, 954.

[11] THOMPSON, BLEWITT et HOLMES, *J. Appl. Physics*, 1956, **28**, 742.

[12] LEIBFRIED (G.), *J. Appl. Physics*, 1959, **30**, 1388 ; 1960, **31**, 117.

[13] GONSER (V.), *J. Matériaux Nucl.*, 1960, **2**, 43.

[14] THOMPSON (M. W.), *Nucleonics*, 1960, **8**, n° 6.

[15] THOMPSON (M. W.) et NELSON (R. S.), *Proc. Roy. Soc.* London, 1961, A **259**, 458.

[16] KOEDAM (M.), *Physica*, 1959, **25**, 742 ; 1960, **26**, 351.

[17] GIBSON (J. B.), GOLAND (A. N.), MILGRAM (M.) et VINEYARD (G. H.), *J. Appl. Physics*, 1959, **30**, 1322 ; *Bull. Amer. Phys. Soc.*, 1960, **5**, 26 ; *Phys. Rev.*, 1960, **120**, 1229.

LETTRES A LA RÉDACTION

RÉACTIONS (p, p xn) SUR LE CÉSIUM

par C. Riehl
Laboratoire de Physique Nucléaire, Orsay (Seine-et-Oise).

Dans le cadre de l'étude des réactions de spallation actuellement en cours au Laboratoire de Physique Nucléaire d'Orsay [1], nous avons irradié du césium par le faisceau de protons du synchrocyclotron pour des énergies variant entre 30 et 155 MeV et nous avons étudié les sections efficaces de formation de divers isotopes du césium [2].

Ces divers isotopes se désintègrent essentiellement par capture électronique sur la couche K. Nous avons observé les isotopes suivants :

Isotope	Période	γ caractéristiques
^{132}Cs	6,2 j	670 keV
^{131}Cs	9,7 j	—
^{129}Cs	31 h	380 keV
^{127}Cs	6,2 h	410 keV

La détermination des sections efficaces se fait par mesure de l'intensité du rayonnement XK de 30 keV émis avec décomposition de la courbe de décroissance d'une part et par mesure de l'intensité des rayonnements γ caractéristiques d'autre part.

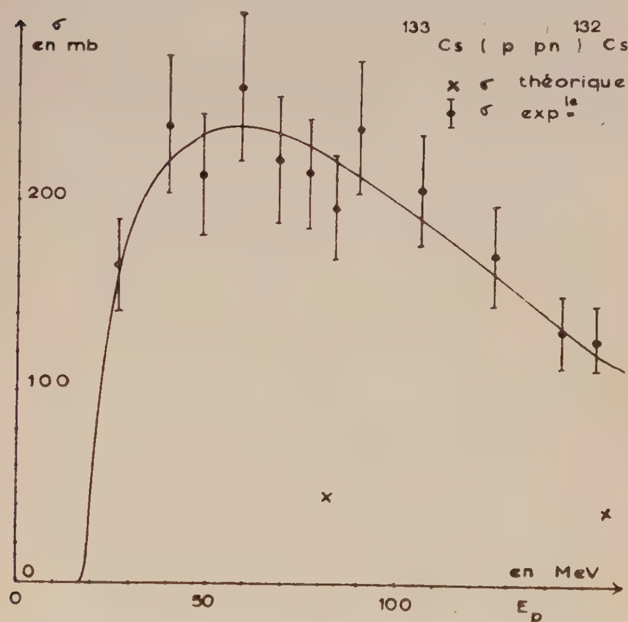


Fig. 1.

Le césium est irradié sous forme de poudre de chlorure de césium. A chaque cible, on associe un moniteur de graphite ou d'aluminium suivant l'énergie.

Le césium est ensuite purifié par séparation chimique et les mesures d'intensité des divers rayonnements sont effectuées par des méthodes de spectrographie γ en utilisant des cristaux de INa comme scintillateur. Les impulsions sont analysées par un sélecteur à 60 canaux.

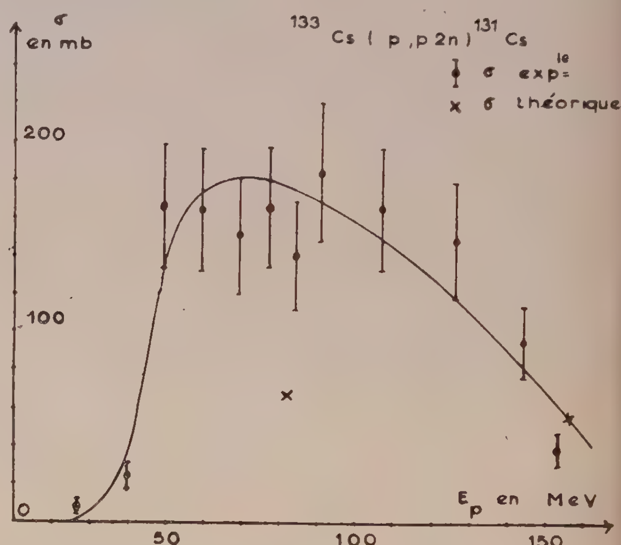


Fig. 2.

Nous avons tenu compte de diverses corrections dans le calcul des sections efficaces : phénomènes d'autoabsorption pour le rayonnement de 30 keV, rapports capture K/capture L, coefficients de conversion interne et influence des filiations radioactives, ce qui nous a permis de déterminer la section efficace de la réaction (p, 5n) en même temps que celle de la réaction (p, p 4n), mais, d'autre part, de n'observer que la section efficace cumulative (p, p 6n) + (p, 7n).

Les erreurs ont été évaluées à 15 % pour la réaction (p, pn), 25 % pour les réactions (p, p 2n) et (p, p 6n) et 50 % pour les réactions (p, p 4n) et (p, 5n) (voir figures 1 à 4).

Si on se réfère au schéma classique des réactions de spallation, processus en deux étapes : interaction directe et évaporation (en négligeant l'évaporation des protons), on peut interpréter l'allure des courbes obtenues. La position à 60 MeV du maximum de la réaction (p, pn) correspond à 45 MeV environ d'énergie de cut-off pour le proton, augmentés d'environ 15 MeV, énergie à laquelle un neutron a la plus grande probabilité d'être évaporé. On observe ensuite, pour les autres réactions, un déplacement du maximum d'environ 10 MeV par neutron supplémentaire évaporé.

D'autre part, la valeur notable des sections efficaces à plus haute énergie peut être attribuée à l'interaction directe.

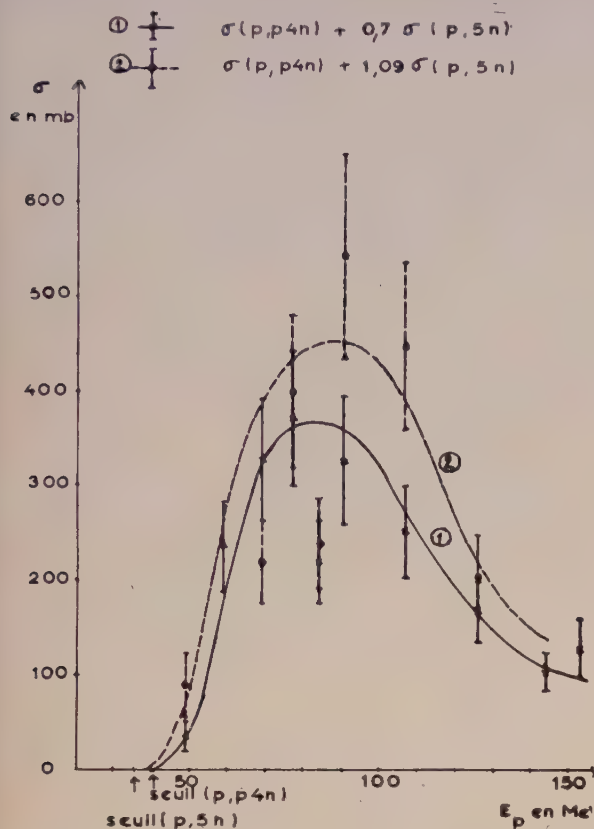


Fig. 3.

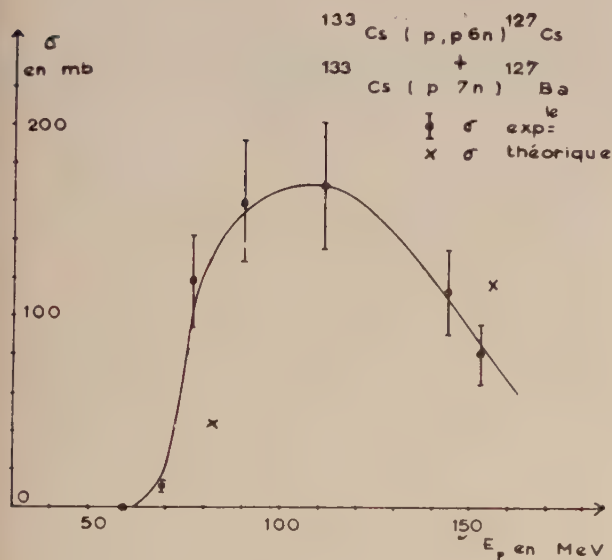


Fig. 4.

Nous avons effectué des calculs théoriques à partir des résultats de Métropolis [3] pour l'interaction directe, et Jackson [4] pour l'évaporation. De façon générale, nous constatons une assez bonne concordance à 155 MeV entre théorie et expérience, mais les calculs théoriques ne rendent pas bien compte des maxima des différentes courbes, sauf pour la réaction (p, pn) pour laquelle nous observons un écart d'un facteur 4 environ. Ce fait est commun aux réaction (p, pn) et laisse prévoir que les approximations effectuées ne sont peut-être pas toutes justifiées et qu'il peut exister un autre processus dont on ne tient pas compte.

Lettre reçue le 22 juin 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Poffé (N.) et al., *J. Physique Rad.*, 1960, **21**, 343. Gusakow (M.) et al., Communication au Colloque de la Société française de Physique, mai 1961. *J. Physique Rad.*, 1961, **22**, 636.
[2] Riehl (C.), D. E. S., Paris, 1961.
[3] Metropolis et al., *Phys. Rev.*, 1958, **110**, 185.
[4] Jackson, *Canad. J. Phys.*, 1957, **35**, 21.

SUR LE MÉCANISME DE LA RÉACTION $^{12}C(\gamma, 3\alpha)$ à 17,6 MeV

Par Wilfrid Sébaoun et Henri Gauvin,
Institut du Radium, Laboratoire Joliot-Curie de Physique Nucléaire, Orsay.

Nous avons utilisé pour cette étude des émulsions ionographiques diluées en gélatine et le rayonnement γ de 17,6 MeV de la réaction $^{7}Li(p, \gamma)$. Dans un précédent travail [1], sur la section efficace de la réaction $^{12}C(\gamma, 3\alpha)$, sont données des précisions sur les conditions de l'expérience et les mesures.

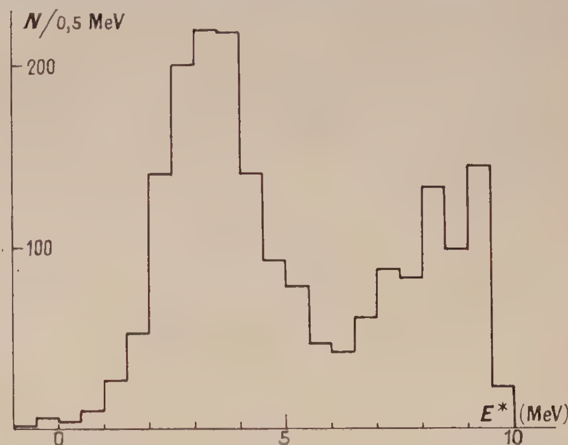


Fig. 1. — Distribution de E^*.

Le mécanisme de la réaction $^{12}C(\gamma, 3\alpha)$ a été discuté antérieurement par plusieurs auteurs [2—10]. Les processus envisagés sont 1° la tripartition directe du noyau de ^{12}C, et 2° l'émission par le noyau excité de ^{12}C d'une particule α_1, suivie de la désintégration du noyau résiduel de ^{8}Be en deux particules α_2 et α_3. Un moyen de vérifier cette dernière hypothèse consiste à examiner la distribution des énergies d'excitation du

^{8}Be. A chaque trace observée, supposée produite par la particule α_1, correspond une énergie d'excitation possible E^*. Les niveaux du ^{8}Be excités doivent faire apparaître des pics dans la distribution de E^*. Évidemment, comme on ne peut identifier α_1, un tiers seulement des valeurs de E^* calculées donnent les niveaux excités du ^{8}Be. La figure 1 montre la distribution obtenue. Cette distribution présente un pic correspondant au niveau connu de 2,9 MeV, de largeur 1,2 ± 0,3 MeV [11], et un pic vers 8,7 MeV. Elle est compatible avec l'interprètation donnée de leur distribution par Glättli et al. [8], qui ont admis, outre l'intervention du niveau de 2,9 MeV, celle de deux niveaux à 4 MeV et 9 MeV, et d'un niveau éventuel vers 7,5 MeV.

Cependant, en dehors du fait que l'existence de ces niveaux autres que celui de 2,9 MeV est incertaine [11], il faut remarquer que cette analyse est insuffisante. En effet, on a, en négligeant la quantité de mouvement du photon :

$$E^* = E_\gamma - Q' - (1 + m/M)\, E_\alpha,$$

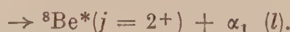
où $E_\gamma = 17{,}6$ MeV est l'énergie du photon, Q' le seuil de la réaction ^{12}C(γ, α)^{8}Be, m la masse de ^{4}He et M la masse de ^{8}Be.

Les pics de la distribution de E^* reproduisent donc ceux de la distribution de E_α (fig. 3). Telegdi [3] a montré qu'on peut rendre compte de la distribution de E_α observée si l'on suppose que la réaction ^{12}C(γ, 3α) à 17,6 MeV implique seulement le niveau de 2,9 MeV du ^{8}Be, à condition de tenir compte de la corrélation angulaire entre α_1 et $\alpha_{2,3}$, calculée en admettant que l'absorption du rayonnement γ est une transition mixte 0,5 $M1$ + 0,5 $E2$, avec peut-être une faible proportion de $E1$.

Nous avons repris la méthode proposée par Telegdi pour analyser nos résultats.

Le niveau de 2,9 MeV du ^{8}Be est un niveau 2+, $T = 0$ [11]. Pour une transition γ du type E2 on a la séquence :

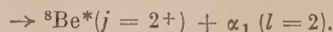

$$^{12}\mathrm{C}(j = 0+) + h\nu \to {}^{12}\mathrm{C}^*(j = 2+)$$


$$\to {}^8\mathrm{Be}^*(j = 2+) + \alpha_1 \ (l).$$

On a principement $l = 0$ et il n'y a pas de corrélation.

Pour une transition $M1$ on a la séquence :


$$^{12}\mathrm{C}(j = 0+) + h\nu \to {}^{12}\mathrm{C}^*(j = 1+)$$

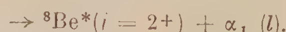

$$\to {}^8\mathrm{Be}^*(j = 2+) + \alpha_1 \ (l = 2).$$

Le niveau de 2,9 MeV de ^{8}Be se désintègre par émission d'une onde de $l = 2$. La fonction de corrélation entre α_1 et $\alpha_{2,3}$, donnée par Telegdi est :

$$W(\theta) = (15/4) \cos^2\theta\ (1 - \cos^2\theta).$$

Pour une transition $E1$ on a la séquence :


$$^{12}\mathrm{C}(j = 0+) + h\nu \to {}^{12}\mathrm{C}^*(j = 1-)$$


$$\to {}^8\mathrm{Be}^*(j = 2+) + \alpha_1 \ (l).$$

On a principalement $l = 1$ et la fonction de corrélation correspondante, calculée à l'aide des formules de Lloyd [12], est

$$W(\theta) = (1/2)\ (1 + 3 \cos^2\theta).$$

Les distributions de $E_{\alpha 1}$ et $E_{\alpha 2,3}$ correspondant aux différents cas ont été calculées en tenant compte de la largeur $\Gamma = 1{,}2$ MeV du niveau de 2,9 MeV du ^{8}Be. Elles sont représentées sur la figure 2.

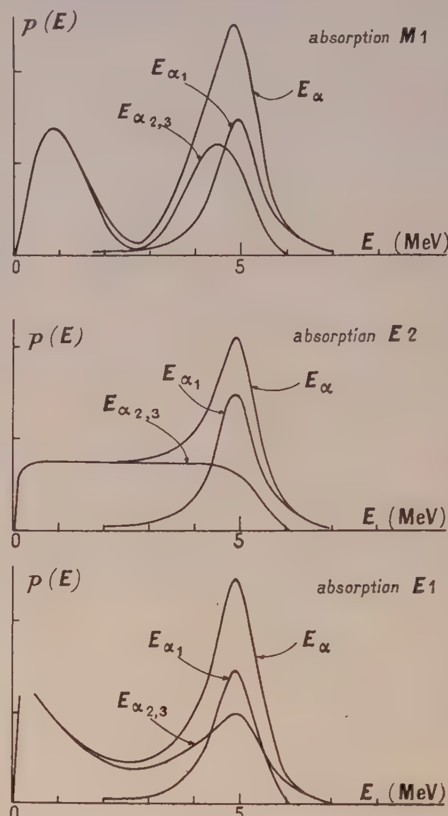


FIG. 2. — Distributions théoriques de E_α.

Dans le cas d'une tripartition directe de ^{12}C*, en l'absence de corrélation entre les particules émises, la distribution de E_α est donnée par :

$$p(E_\alpha) = \mathrm{cte} \times E_\alpha^{1/2}\ [E_T - (3/2)\, E_\alpha]^{1/2},$$

où E_T est l'énergie totale des particules α [5]. Cette relation est représentée par une demi-ellipse.

La figure 3 montre la distribution expérimentale de E_α et deux distributions calculées.

La première courbe correspond à l'hypothèse de Telegdi d'une absorption du rayonnement γ $M1 + E2$. Le meilleur accord avec la distribution expérimentale est obtenu pour le mélange 0,6 $M1$ + 0,4 $E2$. La 2e courbe correspond au cas d'une transition $E1$ pure. C'est le cas qu'il faut envisager si l'on admet que le niveau large de 17,22 MeV de ^{12}C($\Gamma = 1{,}27$ MeV, $j = 1-$, T = 1) est responsable de l'absorption du rayonnement γ de 17,6 MeV [13].

L'accord avec la distribution expérimentale est moins bon que pour la transition $M1 + E2$, mais un déficit d'étoiles comportant une particule α d'énergie $< 0{,}5$ MeV (de parcours $< 1{,}5\ \mu$) pourrait peut-être s'expliquer par le fait que de telles étoiles sont très difficilement identifiables.

Toutefois, cette hypothèse rencontre une difficulté signalée par Goward et Wilkins [9] :

La réaction $^{12}C^*(T = 1) \rightarrow {}^8Be^*(T = 0) + \alpha(T = 0)$ n'est possible qu'à condition d'admettre une certaine impureté des états de spin isotopique de $^{12}C^*$ ou $^8Be^*$.

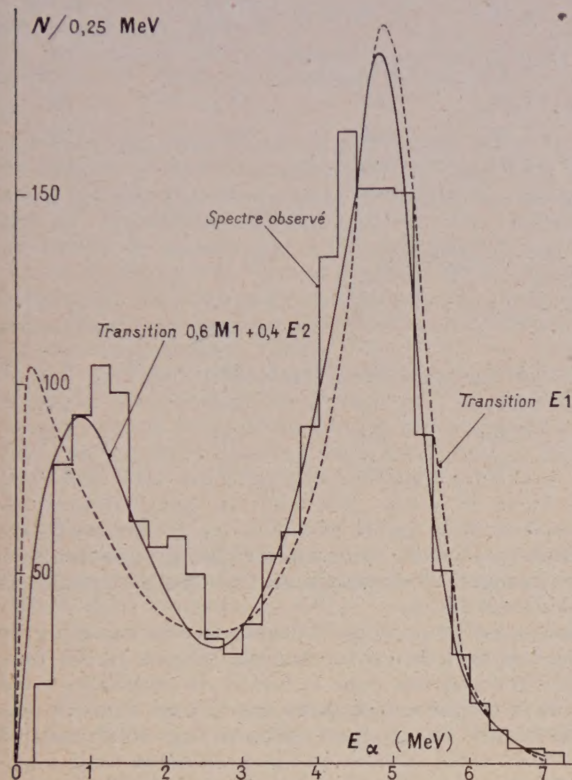


FIG. 3. — Distribution expérimentale et distributions calculées de E_α.

Un moyen de préciser les conclusions de cette analyse serait d'étudier directement la corrélation angulaire entre α_1 et $\alpha_{2,3}$. Malheureusement, la dispersion de $E_{\alpha 1}$ due à la largeur du niveau de 2,9 MeV du ^8Be rend très hasardeuse l'identification de la particule α_1.

Nous remercions Mme Boudet et Mlle Dormeau pour l'aide qu'elles nous ont apportée.

Lettre reçue le 13 *juillet* 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] GARNIER (M.), GAUVIN (H.) et SÉBAOUN (W.), *J. Physique. Rad.*, 1960, **21**, 893.
[2] TELEGDI (V. L.) et ZÜNTI (W.), *Helv. Phys. Acta*, 1950, **23**, 751.
[3] TELEDGI (V. L.), *Phys. Rev.*, 1951, **84**, 600.
[4] EDER (M.) et TELEDGI (V. L.), *Helv. Phys. Acta*, 1952, **25**, 55.
[5] MILLAR (C. H.) et CAMERON (A. G. W.), *Canad. J. Physics*, 1953, **31**, 723.
[6] LIVESEY (D. L.) et SMITH (C. L.), *Proc. Phys. Soc.*, 1953, **66A**, 689.
[7] CHASTEL (R.), *J. Physique Rad.*, 1954, **15**, 240.
[8] GLÄTTLI (H.), LOEPFE (E.) et STOLL (P.), *Helv. Phys. Acta*, 1955, **28**, 366.
[9] GOWARD (F. K.) et WILKINS (J. J.), *Proc. Roy. Soc.*, 1955, **228**, 376.
[10] MUTO (J.), TAKETOSHI (E.), NAKAMURA (T.), INAMURA (A.) et TSUNEOKA (Y.), *J. Phys. Soc. Jap.*, 1957, **12**, 109.
[11] AJZENBERG-SELOVE (F.) et LAURITSEN (T.), *Nuclear Physics*, 1959, **11**, 1.
[12] LLOYD (S. P.), *Phys. Rev.*, 1951, **83**, 716.
[13] PAUL (P.) et STIERLIN (U.), *Nuclear Physics*, 1959, **13**, 576.

QUELQUES PROPRIÉTÉS DE GRENATS COMPLEXES DE TERRES RARES

par Gérard VILLERS et Jean LORIERS,

Laboratoire de Magnétisme et de Physique du Solide et Laboratoire des Terres Rares, C. N. R. S. Bellevue (Seine-et-Oise).

Dans les travaux antérieurs [1, 2, 3] nous avons exposé les propriétés de grenats mixtes de terres rares répondant à la formule : $5\,Fe_2O_3.\ x\,Yt_2O_3,\ (3 - x)\,Yt'_2O_3$ (Yt et Yt' désignant soit l'yttrium, soit une terre

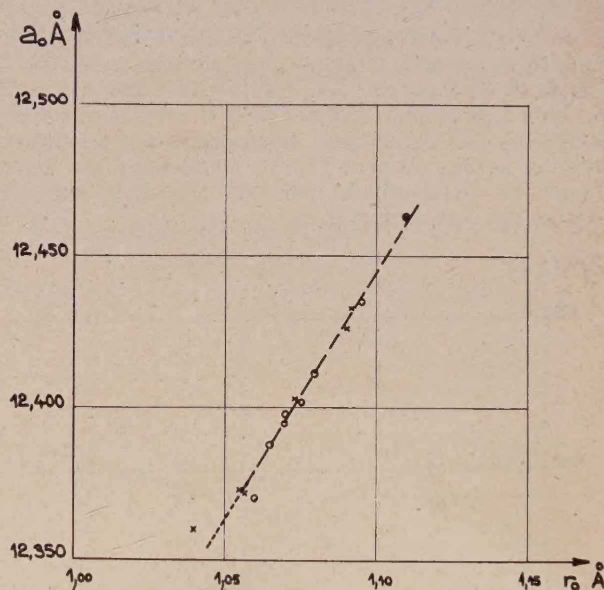
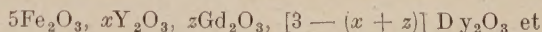
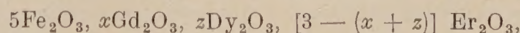


FIG. 1.

rare. Nous donnerons ici les résultats expérimentaux obtenus sur des grenats plus complexes représentés par la relation moléculaire : $5\,Fe_2O_3,\ x\,Yt_2O_3,\ zYt'_2O_3, [3 - (x + z)],\ Yt''_2O_3$ (Yt, Yt', Yt" désignant soit l'yttrium, soit des terres yttriques). A cet effet nous avons choisi deux groupes distincts : le premier comprend l'yttrium et deux terres yttriques, le second comporte trois terres yttriques différentes dans la maille du grenat. Comme exemples, caractérisant ces deux groupes, nous avons retenu les systèmes :



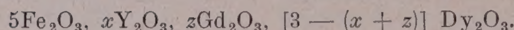
$$5Fe_2O_3,\ xY_2O_3,\ zGd_2O_3,\ [3 - (x + z)]\ Dy_2O_3 \text{ et}$$



$$5Fe_2O_3,\ xGd_2O_3,\ zDy_2O_3,\ [3 - (x + z)]\ Er_2O_3,$$

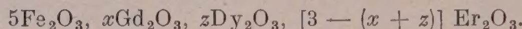
dans lesquels nous avons fait varier x et z de 0 à 3 avec $(x + z) \leqslant 3$ et en nous limitant à la condition

TABLEAU 1


$5Fe_2O_3$, xY_2O_3, zGd_2O_3, $[3 - (x + z)]\ Dy_2O_3$.

xY_2O_3	zGd_2O_3	$[3 - (x + z)]\ Dy_2O_3$	a_0 Å	r_0 Å	θ_f °K	θ_c °K MESURÉ	θ_c °K THÉORIQUE
2,0	0,5	0,5	12,395	$1{,}07_0$	555	—	51
1,0	1,0	1,0	12,412	$1{,}08_0$	557	155	152
0,5	0,5	2,0	12,402	$1{,}07_5$	558	193	191
0,5	2,0	0,5	12,435	$1{,}09_5$	560	212	212

TABLEAU 2


$5Fe_2O_3$, xGd_2O_3, zDy_2O_3, $[3 - (x + z)]\ Er_2O_3$.

xGd_2O_3	zDy_2O_3	$[3 - (x + z)]\ Er_2O_3$	a_0 Å	r_0 Å	θ_f °K	θ_c °K MESURÉ	θ_c °K THÉORIQUE
2,0	0,5	0,5	12,434	$1{,}09_2$	559	234	236
1,0	1,0	1,0	12,403	$1{,}07_3$	556	190	191
0,5	0,5	2,0	12,372	$1{,}05_7$	550	130	125
0,5	2,0	0,5	12,400	$1{,}07_2$	554	208	203

$2z = 3 - x$. On remarquera d'une part que si x et z s'annulent en même temps nous sommes ramenés à l'étude de grenats simples, d'autre part que si $x = 0$ (ou bien $z = 0$) nous sommes dans le cas des systèmes de grenats mixtes binaires. Des points expérimentaux obtenus antérieurement [1, 2], concernant ces deux conditions particulières, ont été reportés sur les courbes des figures 1 et 2.

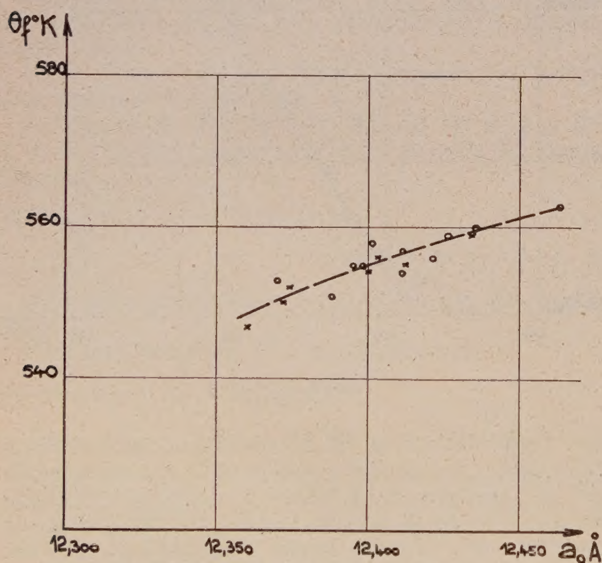


FIG. 2.

Ces différentes compositions ont été préparées par coprécipitation à partir d'oxydes de terres rares et de fer de pureté supérieure à 99,9 % en utilisant les méthodes déjà décrites [1] ; les propriétés physiques mentionnées sont relatives à des matériaux frittés à 1350 °C pendant quatre heures dans l'air et refroidis en quinze heures environ dans le four.

Sur ces ferrites nous avons mesuré les valeurs des paramètres de la maille cristalline a_0, des températures de Curie θ_f °K et de compensation θ_c °K ; nos résultats sont consignés, pour chacun de ces deux groupes, dans les tableaux 1 et 2.

La courbe de la figure 1 représente la variation de a_0 en fonction du rayon ionique moyen r_0 des ions terres rares entrant dans le réseau du grenat (r_0 a été calculé à partir des dimensions d'ions données par Goldschmidt et de leurs proportions relatives). Il ressort de cette courbe que le paramètre croît régulièrement et dans le même sens que r_0. Sur la figure 2 nous avons reproduit la courbe montrant la variation des points de Curie θ_f °K en fonction de a_0. On remarque, comme nous l'avions déjà constaté sur des grenats mixtes binaires [1, 2], que les points de Curie sont d'autant plus élevés que le paramètre cristallin est plus grand. Dans les tableaux 1 et 2, pour les compositions étudiées, nous mentionnons également les températures des points de compensation θ_c°K théoriques. Ces dernières ont été obtenues graphiquement à partir des aimantations spontanées des trois sous-réseaux 16*a*, 24*d* et 24*c* calculées par R. Pauthenet [4], en fonction de la température ; nous avons tenu compte évidemment de la proportion relative des différents ions terres rares placés sur les sites 24*c* et nous avons adopté le modèle ferrimagnétique proposé par L. Néel [5]. On notera que les résultats théoriques et expérimentaux sont en bon accord.

Lettre reçue le 21 *juillet* 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] VILLERS (G.), LORIERS (J.) et CLAUDEL (Mlle C.), *C. R. Acad. Sc.*, 1958, **247**, 710.
[2] VILLERS (G.), LORIERS (J.), *C. R. Acad. Sc.*, 1958, **247**, 1101.
[3] LORIERS (J.), VILLERS (G.), *C. R. Acad. Sc.*, 1961, **252**, 1590.
[4] PAUTHENET (R.), Thèse, Grenoble, *Ann. Physique*, mai-juin 1958, **3**, 5-6, 424.
[5] NÉEL (L.), *C. R. Acad. Sc.*, 1954, **239**, 8.

UNIFORMISATION DU VECTEUR CHAMP MAGNÉTIQUE SUR L'AXE D'UNE HÉLICE

Par M. Papoular,
Laboratoire d'Électronique et de Radioélectricité,
Fontenay-aux-Roses (Seine).

1. — Il est intéressant, en métrologie par exemple, de réduire le champ magnétique sur l'axe d'un solénoïde (hélice) à sa composante longitudinale, qui seule est de répartition axiale uniforme (les méthodes modernes de mesure par résonance magnétique nucléaire portent sur le vecteur H total). Nous supposons qu'il s'agit d'un solénoïde infiniment long (autrement dit : les considérations qui suivent ne nous dispensent pas des corrections de bout).

2. — Le calcul permet de déterminer de façon rigoureuse la structure de ce champ [1] : *a*) le vecteur champ, en un point M de l'axe a une longueur constante et fait avec l'axe un angle constant ; *b*) ce vecteur est situé dans un plan perpendiculaire à MA, A étant le point du solénoïde, qui a la même cote que M.

Compte tenu de ces résultats, on peut améliorer l'uniformité du champ au voisinage de l'axe, en intercalant dans la première hélice, une deuxième, identique, parcourue dans le même sens par le même courant, mais décalée d'un demi-pas par rapport à la première [2].

Sur l'axe, on obtient ainsi une compensation à la fois simple et *rigoureuse* des composantes transversales.

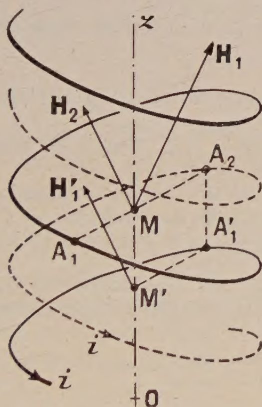


Fig. 1.

En effet, A_1 et A_2 étant symétriques par rapport à Oz, H_1, H_2 et Oz sont dans un même plan, et H_2 étant équipollent à H'_1, ne peut qu'être symétrique de H_1 par rapport à Oz. Il est intéressant de noter que la compensation sur l'axe est rigoureuse, quel que soit le pas commun des deux solénoïdes associés. Dans la pratique, on pourra enrouler en hélice un cordon bifilaire dont on mettra les deux brins en série. On se heurte évidemment à des difficultés technologiques quand on veut atteindre la haute précision requise en métrologie, notamment sur la longueur du pas [3].

3. — Pour les applications, il est nécessaire d'évaluer le degré de compensation obtenu *aux environs de l'axe*, afin de délimiter le cylindre utile où le taux d'uniformité désiré est réalisé. Reprenons le calcul du champ, mais cette fois en un point quelconque M(X, Y, Z). Nous ferons au voisinage de l'axe, un développement en série de l'expression trouvée, que nous limiterons au 1er ordre.

Ainsi par exemple pour la composante H_x, l'élément de cote $z = kt$ de la 1re hélice, donne :

$$(\mathrm{d}H_x)_1 = (\mathrm{d}H_x)_0 \left[1 + \frac{3R(X\cos t + Y\sin t)}{R^2 + (Z - kt)} - \frac{kY}{R(Z-kt)\cos t + Rk\sin t}\right].$$

L'élément de même cote de la 2e hélice, donne :

$$(\mathrm{d}H_x)_2 = (\mathrm{d}H_x)_0 \left[1 - \frac{3R(X\cos t + Y\sin t)}{R^2 + (Z - kt)^2} + \frac{kY}{R(Z-kt)\cos t + Rk\sin t}\right]$$

$(\mathrm{d}H_x)_0$ représente la contribution de l'élément $z = kt$ de la 1re hélice au point M(O, O, Z) sur l'axe :

$$(\mathrm{d}H_x)_0 = i\,\frac{R(Z-kt)\cos t + Rk\sin t}{[R^2 + (Z-kt)^2]^{3/2}}\,\mathrm{d}t.$$

On opère le changement variable :

$$Z - kt = -Ru.$$

Et on obtient au total, après des calculs simples :

$$H_x = 4i\int_0^\infty \left[\frac{3Y}{2R^2}\frac{1}{(1+u^2)^{5/2}} - \frac{Y}{R^2}\frac{1}{(1+u^2)^{3/2}}\right]$$
$$+ \frac{6i}{kR} X \sin\frac{2Z}{k} \int_0^\infty \frac{u\sin^2\frac{Ru}{k} + \frac{k}{R}\cos 2\frac{Ru}{k}}{(1+u^2)^{5/2}}\,\mathrm{d}u$$
$$- \frac{6i}{kR} Y \cos\frac{2Z}{k} \int_0^\infty \frac{u\sin^2\frac{Ru}{k} + \frac{k}{R}\cos 2\frac{Ru}{k}}{(1+u^2)^{5/2}}\,\mathrm{d}u.$$

Il est commode de poser : $\alpha = 2R/k$.

On utilise alors la relation :

$$\int_0^\infty \frac{\cos\alpha u}{(1+u^2)^{n+1/2}}\,\mathrm{d}u = \frac{2^n}{1.3.5\ldots(2n-1)}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^n K_n(\alpha)$$

où K_n est la fonction de Bessel modifiée, de 2e espèce.

On obtient :

$$H_x = 4i\left[\frac{Y}{2R^2}\lim_{\alpha\to 0}(\alpha^2 K_2(\alpha)) - \frac{Y}{R^2}\lim_{\alpha\to 0}(\alpha K_1(\alpha))\right]$$
$$+ \frac{2i}{kR}\left(X\sin\frac{2Z}{k} - Y\cos\frac{2Z}{k}\right)[\alpha^2 K_1(\alpha) + 2\alpha K_2(\alpha)].$$

Le comportement des fonctions $K_n(\alpha)$ quand α tend vers zéro, fait que le premier terme entre crochets est nul. Quant au second, on peut profiter de la relation de récurrence :

$$K_{\nu+1}(\alpha) = K_{\nu-1}(\alpha) + \frac{2\nu}{\alpha}K_\nu(\alpha)$$

pour le mettre sous la forme :

$$2\alpha\, K_0(\alpha) + (4 + \alpha^2)\, K_1(\alpha).$$

Le calcul de H_y est mené suivant les mêmes considérations. Nous négligeons la variation de H_z au voisinage de l'axe, qui est nulle au 1er ordre [4]. On arrive finalement à :

$$H_x = 4\pi\, niG(\alpha) \left[\frac{X}{R}\sin\frac{2Z}{k} - \frac{Y}{R}\cos\frac{2Z}{k}\right]$$

$$H_y = -\,4\pi\, niG(\alpha) \left[\frac{X}{R}\cos\frac{2Z}{k} + \frac{Y}{R}\sin\frac{2Z}{k}\right]$$

$$H_z = 4\pi\, ni$$

avec :

$$n = \frac{1}{2\pi\, k}\left(= \frac{1}{\text{pas}}\right)$$

$$G(\alpha) = 2\alpha\, K_0(\alpha) + (4 + \alpha^2)\, K_1(\alpha).$$

On voit immédiatement que lorsqu'on déplace le point M parallèlement à l'axe, à la distance r de celui-ci, l'extrémité du vecteur champ décrit une hélice de pas $2\pi\, k/2$ et de rayon :

$$4\pi\, niG(\alpha)\, r/R.$$

En l'absence de compensation au contraire, l'extrémité du vecteur champ, en un point M_0 de l'axe, décrirait une hélice de même pas $2\pi k$ que l'hélice solénoïde et de rayon [1] :

$$4\pi\, niF\left(\frac{\alpha}{2}\right), \text{ avec : } F\left(\frac{\alpha}{2}\right) = K_1\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \frac{\alpha}{2} K_0\left(\frac{\alpha}{2}\right).$$

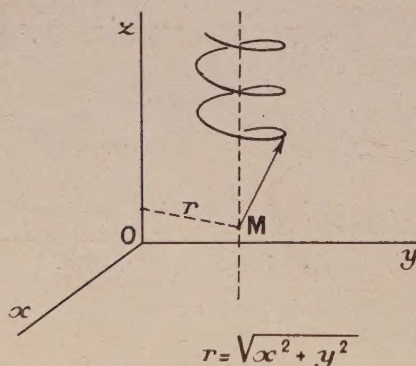


Fig. 2.

Le degré de compensation réalisé au voisinage de l'axe, sera donc mesuré par :

$$\frac{\Delta H \text{ transv.}}{H \text{ transv.}} = \frac{r}{R} \cdot \frac{G(\alpha)}{F(\alpha/2)}.$$

Pour $\alpha \gtrsim 15$, on a l'expression asymptotique :

$$\frac{\Delta H \text{ transv.}}{H \text{ transv.}} = \alpha\sqrt{2}\, e^{-\alpha/2}\, \frac{r}{R}.$$

4. — Le calcul précédent est relatif à des hélices « théoriques » dont les spires seraient sans épaisseur. Il donne cependant l'ordre de grandeur de l'homogénéité de champ réalisable dans un solénoïde (*double*) de type ordinaire.

Par exemple pour un solénoïde du genre du NBS 590 80 :

$$2R = 280 \text{ mm},\ p = 2\pi k = 1 \text{mm},\ r = 50 \text{ mm},$$

α étant voisin de 2 000, on voit que l'homogénéité est pratiquement parfaite. Par suite de la compensation des composantes transversales, le solénoïde double peut se construire avec un diamètre plus petit, sans nuire à l'uniformité du champ : on gagne alors sur l'importance des corrections de bout à effectuer.

En application des résultats précédents, on peut envisager une méthode de compensation « naturelle » des composantes transversales du champ magnétique. Il suffirait d'enrouler en hélice une *bande* métallique, de façon que l'intervalle entre spires soit faible devant la largeur de la bande. Pratiquement en effet, à chaque hélice-ligne de courant est alors associée une hélice « compensatrice » décalée d'un demi-pas. Il s'agit d'un raisonnement analogue à celui que l'on fait en optique, en ce qui concerne les fentes de diffraction.

Lettre reçue le 28 juillet 1961.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Bernard (M.), *Bull. Union des Phys.*, 49e année, mai-juin 1955, p. 335-342.

[2] Cette idée a été élaborée en collaboration avec G. Weil du Laboratoire de Bellevue.

[3] Driscoll (R. L.) et Bender (P. L.), *Phys. Rev., Lett.*, 1958, **1**, Nb 11.

[4] L'expression de H_z comporte, de même que celles de H_x et H_y, un terme indépendant de α :

$$\frac{i}{k}\frac{r^2}{R^2} \lim_{\alpha \to 0} [\alpha^3 K_3(\alpha) - 4\alpha^2 K_2(\alpha)].$$

De même que pour H_x et H_y, ce terme est nul, si bien que l'on peut effectivement négliger la variation de H_z.